



FZR-240



# JAHRESBERICHT 1997

BRD

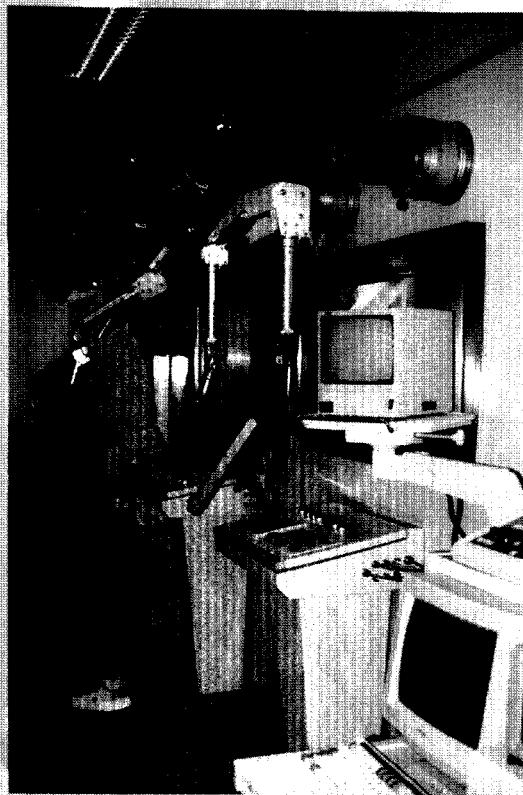
# **FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF**

**Jahresbericht 1997**

**Herausgeber:** Vorstand

**Redaktion:** Dr. Jürgen Leib

**FZR-240**



## EINLEITUNG

---

Copyright © 2001 by Thieme Medical Publishers, Inc., 381 Park Avenue, East Norwalk, CT 06854-2048, USA. All rights reserved. Printed in Germany.

Abb. S. 4  
Radioisotopenlabor für Werkstoffuntersuchungen

# INHALTSVERZEICHNIS

---

Vorwort .....	7
Ereignisse 1997 .....	11
Ergebnisse der Forschungsarbeit .....	15
Radiopharmazeutische Sonden für die medizinische Diagnostik: Auf dem Wege zu einer neuen Generation von Technetium-99m-Radiopharmaka .....	17
Ionenstrahlsynthese von Halbleiternanoclustern für elektrooptische Anwendungen Und es leuchtet doch... ! Blaue Lumineszenz aus Si-Strukturen .....	23
Die Rolle von Huminsäuren in der Umwelt .....	30
Mesoskopische Quanteneffekte in Atomkernen .....	36
DYN3D ein dreidimensionales Computermodell für die Analyse hypothetischer Störfallabläufe in Kernreaktoren .....	42
Das Forschungszentrum Rossendorf - Daten und Fakten 1997 .....	51
Organigramm .....	52
Organe und Gremien .....	53
Überblick 1997 .....	55
Übersicht über die Forschungsschwerpunkte und -vorhaben 1997 .....	56
Übersicht über die zentrumsübergreifende Zusammenarbeit .....	57
Übersicht über die Institute und die wissenschaftlich-technische Infrastruktur .....	59
■ Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung .....	61
○ Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie .....	65
■ Institut für Radiochemie .....	69
■ Institut für Kern- und Hadronenphysik .....	73
■ Institut für Sicherheitsforschung .....	77
■ Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik .....	80
■ Zentralabteilung Analytik .....	83
■ Zentralabteilung Neue Beschleuniger .....	84
■ Abteilung Kommunikation und Datenverarbeitung .....	86
■ Projektgruppe ESRF-Beam-Line .....	88
■ Projektgruppe ELBE-Quelle .....	90
■ Administrative und Technische Infrastruktur .....	92

# VORWORT

---

Das Forschungszentrum Rossendorf (FZR) wurde Ende 1991 gegründet und nahm am 1. Januar 1992 seine Arbeit auf. Als Einrichtung der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz (WGL) wird es zu gleichen Teilen vom Freistaat Sachsen und der Bundesrepublik Deutschland finanziert. Seine Aufgabe ist die anwendungsorientierte Grundlagenforschung auf Gebieten von Naturwissenschaft und Technik. Dabei spielt die Zusammenarbeit mit Universitäten und der Industrie eine besondere Rolle. Das FZR verfügte zum Ende des Berichtsjahrs 1997 über 432,5 Planstellen aus Mitteln der Grundfinanzierung von 85 Mio. DM. Aus Annex-Mitteln (1,6 Mio. DM) konnten darüber hinaus 44 Stellen für Nachwuchswissenschaftler und 23 für Auszubildende finanziert sowie 232 Gastwissenschaftlern aus 26 Ländern Aufenthalte mit unterschiedlicher Verweildauer ermöglicht werden. Das FZR wirbt jährlich Drittmittel (12 Mio. DM) u.a. für 126 weitere Stellen ein.

Die wissenschaftliche Arbeit des FZR wird in folgenden Instituten durchgeführt:

- Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung
- Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie
- Institut für Radiochemie
- Institut für Kern- und Hadronenphysik
- Institut für Sicherheitsforschung.

Sie werden hierbei unterstützt durch die Zentralabteilungen:

- Forschungs- und Informationstechnik
- Neue Beschleuniger
- Analytik (bis Ende 1997)

und die Projektgruppen:

- ESRF-Beam-Line
- ELBE-Quelle.

Darüber hinaus existiert eine leistungsfähige technische und administrative Infrastruktur, die auch die Abteilungen Bibliothek sowie Kommunikation und Datenverarbeitung umfaßt. Die Profilierung und Entwicklung des Forschungszentrums orientiert sich an den Herausforderungen, die Wissenschaft und Gesellschaft an eine große Forschungseinrichtung

stellen. Gegenwärtig stehen hierbei in Rossendorf spezielle Probleme der Medizin, der Ökologie, der Materialforschung und der Sicherheit des Menschen in seiner technischen Umwelt im Vordergrund. Daneben gibt es, aus der Rossendorfer Tradition gewachsen, weiterhin ein Engagement auf dem Gebiet der Kernphysik.

Moderne Forschungen über Radiotracer für die medizinische Tomographie und in der Radioökologie bestimmen das Profilgebiet **Biomedizin-Chemie, Umwelt**. Dabei wird die auf die Aufklärung biochemischer Vorgänge gerichtete PET-Forschung mit Forschungen zur Single-Photon-Emissions-Computer-Tomographie (SPECT) mit dem Ziel zusammengeführt, biochemische Tracerkonzepte von PET möglichst auf Technetiumverbindungen zu übertragen. Somit werden die beiden Seiten der medizinischen Diagnostik mit radioaktiven Tracern zusammen betrachtet und einer breiten klinischen Nutzung zugänglich gemacht („von PET zu SPECT“). Diese Synthese ist innovativ und charakteristisch für das FZR; sie verspricht neue Ansätze für die medizinische Diagnostik. Die Forschungsarbeiten werden in Kooperation mit dem Universitätsklinikum der Technischen Universität Dresden durchgeführt. Aktuelle Anwendungsfelder sind die Nuklearpharmazie und die Hirnforschung.

Die radioökologischen Arbeiten des FZR stützen sich auf langjährige Erfahrungen in der Radiochemie. Die Untersuchung des Verhaltens von Radioaktivität tragenden Molekülen in ökologischen Systemen ist das Aufgabenfeld dieser Arbeitsrichtung. Hierzu bedient man sich moderner strahlungsphysikalischer, element- und strukturanalytischer Techniken, wie z. B. der Laserspektroskopie und der Synchrotronstrahlung, die für die Messung radioaktiver Proben ausgelegt sind.

Diese Forschungen liefern zum einen Beiträge zum Grundlagenverständnis und sind zum anderen von großer und bleibender Bedeutung für die Entwicklung effektiver Sanierungsstrategien für radioaktiv belastete Gebiete. Dabei werden konventionelle Konzepte auf ihre Anwendbarkeit überprüft und erprobt, aber auch neuartige z. B. moderne mikrobiologische Verfahren erforscht und entwickelt. Für die in Sachsen und Thüringen anstehenden Sanierungsarbeiten des Uranbergbaus sind sie von hoher Aktualität.

Bei der **Materialforschung** stehen Arbeiten mit Ionenstrahlen für die Modifikation und Analyse von Festkörperoberflächen sowie Forschungen zur Materialsicherheit im Vordergrund. Das Ionenstrahlzentrum des FZR verfügt über eine umfangreiche Ausrüstung für ionenphysikalische Untersuchungen. Für die ionen- und plasmagestützte Schichtabscheidung werden Ionenenergien von wenigen 10 eV bis in den 10 MeV-Bereich eingesetzt. Daneben wird zunehmend Synchrotronstrahlung zu Materialuntersuchungen eingesetzt, wobei sich die Hauptaktivitäten in Zukunft von Hamburg zum eigenen Strahlrohr in Grenoble verlagern werden. Da auch modernste Methoden und Verfahren der Analysen- und Präparationstechnik zur Verfügung stehen, wird das Forschungszentrum mehr und mehr zu einem führenden Ionenstrahlzentrum. Das FZR ist Mitglied des Materialforschungsverbundes Dresden.

Die **Sicherheit** und Zuverlässigkeit technischer Anlagen ist entscheidend für die Nutzbarkeit innovativer Technologien und bestimmt darüber hinaus deren Akzeptanz durch die Bevölkerung. Das Forschungszentrum betreibt aus diesem Grund Sicherheitsforschung zur Bewertung der Risiken technischer Anlagen und zur Erhöhung ihrer Betriebssicherheit. Ausgehend von Sicherheitsanalysen zu den russischen Druckwasserreaktoren ist der Schwerpunkt des Themenspektrums auf westliche Leichtwasserreaktoren und nichtnukleare Anlagen verschoben worden. Mit den Untersuchungen zur Materialalterung und -schädigung wird das Rossendorfer Engagement in der Materialforschung ergänzt. Hierbei spielen Arbeiten zur Beurteilung des Zustands neutronenversprödeter Konstruktionsmaterialien eine besondere Rolle. Für die Präparation und Prüfung aktivierter Stähle sind Radionuklidlabors aufgebaut worden.

Moderne **Kernphysik** beinhaltet die Untersuchung von Kernmaterie unter extremen Bedingungen und schließt die Physik der Hadronen im Kern ein. Die experimentellen Forschungen des FZR zu diesem Arbeitsgebiet werden an externen Beschleunigern z. B. der GSI Darmstadt und des FZ Jülich und bei der TU Darmstadt durchgeführt. Für die technische Realisierung der experimentellen Arbeiten steht ein in den letzten Jahren aufgebautes Detektorlabor zur Verfügung. Kernphysikalisches Experimentieren in Rossendorf wird in

Zukunft durch den Aufbau des ELBE-Elektronenbeschleunigers ermöglicht werden.

Die Arbeiten des FZR führen zunehmend zu einer Vernetzung der Institute und Abteilungen. Derzeit konzentrieren sich dabei die instituts- und disziplinübergreifenden Aufgaben auf:

- Konstruktion, Aufbau und Überlegungen zur Nutzung der Strahlungsquelle ELBE
- die Nutzung der Synchrotronstrahlung, vor allem für die Radiochemie und die Materialforschung
- den Einsatz der Positronen-Emissions-Tomographie für die Medizin und in der Strömungsmechanik
- den Einsatz radioaktiver Tracer und den Transport von Radionukliden in Bio- und Ökosystemen.

Die durch die Interdisziplinarität geprägten Forschungsarbeiten des Zentrums werden in Kooperation mit wissenschaftlichen Einrichtungen der Region sowie mit vielen deutschen und europäischen Forschungseinrichtungen durchgeführt. Das Forschungszentrum unterhält dabei gute Beziehungen zu den umliegenden Hochschulen, insbesondere zur Technischen Universität Dresden. Die wissenschaftlichen Direktoren des Zentrums sind Professoren an der TU Dresden.

Die wissenschaftlich-technischen Vorhaben des FZR werden zweimal im Jahr von einem externen Wissenschaftlichen Beirat bewertet.

Das wichtigste Ereignis des Jahres 1997 für das FZR war die Genehmigung des Finanzierungsplanes für den Bau der „Strahlungsquelle ELBE“, dem mit einer Planungssumme von 25 Mio. DM größten Zukunftsprojekt des Forschungszentrums. Das Herzstück dieses Forschungsgrößgerätes stellt ein supraleitender Linearbeschleuniger dar, der einen kontinuierlichen Elektronenstrahl hoher Brillanz mit einer Energie von 40 MeV und einem Strom von 1 mA bei geringer Emittanz liefern wird. Vorarbeiten und Experimente, wie der Bau und Test von Elektroneninjektoren und der supraleitenden Beschleunigerstrukturen begleiten die Planungsphase. Der erzeugte Elektronenstrahl wird neben den grundlegenden Untersuchungen zur Strahlungsphysik, zur Erzeugung von intensiver Röntgenstrahlung und später evtl. auch von Positronen verwendet werden.

Vornehmlich aber wird die Erzeugung von intensivem Infrarot-Licht mittels eines Freie-Elektronen-Lasers (FEL) sowie die Erzeugung von Neutronen mittels eines Spallationstargets im Vordergrund stehen. Das Neutronenlabor wird von der TU Dresden finanziert und betrieben, die als enger Partner für dieses Teilprojekt auftritt. Das mit dem FEL erzeugte intensive, quasi-kontinuierliche, in einem Wellenlängenbereich von 5 bis 150 Mikrometer durchstimmbare Infrarot-Licht erschließt einen physikalisch und für die Materialforschung sehr interessanten, bisher schwer zugänglichen Spektralbereich für die Spektroskopie, der besonders auf dem Gebiet der Halbleitermaterialien von Bedeutung ist. Der Freie-Elektronen-Laser wird dabei auch externen Nutzern aus Deutschland und Europa zur Verfügung stehen. Die Arbeiten werden im FZR vorrangig in den Zentralabteilungen Forschungs- und Informationstechnik sowie Neue Beschleuniger und im Institut für Kern- und Hadronenphysik durchgeführt, unterstützt durch Kooperationen vor allem mit der Stanford Universität, DESY Hamburg und der TH Darmstadt. Sie werden begleitet durch Workshops und Seminare zum Bau und zur Nutzung der Strahlungsquelle sowie dem ersten, interdisziplinären „Nutzertreffen für den Freie-Elektronen-Laser der ELBE-Strahlungsquelle“ im Dezember 1997.

Auch bei den anderen größeren Projekten des FZR konnten bedeutende Fortschritte erzielt werden. So sind die Arbeiten am Strahlrohr ROBL am europäischen Synchrotron ESRF in Grenoble so weit fortgeschritten, daß bereits Ende des Jahres 1997 erste Strukturuntersuchungen mit Synchrotronstrahlung durchgeführt werden konnten. Die bei der Projektierung der Anlage avisierten Spezifikationen konnten bei diesem Testbetrieb bereits nahezu vollständig erreicht werden. Die offizielle Einweihung der Anlage fand Anfang Juni 1998 statt, die Aufnahme des regulären Nutzerbetriebes ist für Herbst 1998 vorgesehen. Besonders hervorzuheben ist dabei, daß die Rossendorfer Einrichtung in einer weltweit einzigartigen Weise die modernen Methoden der Spektroskopie mit Synchrotronstrahlung auch für die Untersuchung radioaktiver Proben erschließt. Aus dem FZR sind derzeit vier Wissenschaftler und ein Techniker permanent in Grenoble.

Das PET-Zentrum Rossendorf wurde nach der Inbetriebnahme des Zyklotrons und Erlangen des Status eines Arzneimittelherstellers (Janu-

ar 1997) sowie der Inbetriebnahme der PET-Kamera (Mai 1997) am 15. Oktober 1997 durch den sächsischen Staatsminister für Wissenschaft und Kunst, Prof. Dr. Hans Joachim Meyer und den Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie, Dr. Fritz Schaumann, im Beisein zahlreicher hochrangiger Gäste eingeweiht. In enger Kooperation mit der Universitätsklinik Dresden wurde der medizinische Routinebetrieb aufgenommen. Dabei werden heute unter kompletter Auslastung der vorhandenen Kapazität zehn bis fünfzehn Patienten pro Woche aus ganz Sachsen untersucht.

Das Institut für Kern- und Hadronenphysik wird sich neben seinen traditionellen Arbeiten zur Kern- und Hadronenphysik in Zukunft verstärkt auf die neuen Aufgaben im Zusammenhang mit der ELBE-Strahlungsquelle einstellen. Im Institut für Sicherheitsforschung wurde eine Abteilung Magneto hydrodynamik gegründet. Diese Gründung trägt der starken Ausweitung dieser Arbeiten Rechnung, die im wesentlichen durch Projektmittel, und dabei insbesondere durch ein Innovationskolleg der DFG, finanziert werden. Insgesamt fand in diesem Institut eine weitere Konzentration der Arbeitsgebiete und eine engere Verflechtung mit den Arbeiten der anderen Institute statt. Der weitere Ausbau des Ionenstrahlzentrums konnte durch Fertigstellung des Anbaus für die Ionenstrahltechnik vorangetrieben werden. Besonders die Arbeiten zur Halbleiterphysik am Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung nehmen aufgrund hochinteressanter Ergebnisse und zunehmender Kontakte mit der Industrie einen immer breiteren Raum ein, so daß die Aktivitäten auf diesem Gebiet auf Empfehlung des wissenschaftlichen Beirats und des Kuratoriums in Zukunft weiter verstärkt werden.

Die Anstrengungen zur anwendungsorientierten Forschung am FZR und zum Technologietransfer wurden auch durch die Verleihung des Innovationspreises der deutschen Wirtschaft 1997 gewürdigt, der der Gesellschaft für Silizium-Mikrosystem mbH (GeSiM mbH) im Bereich „Start-Up-Unternehmen“ für die Entwicklung von Fluidik-Komponenten in Siliziumtechnologie („Kleinste Pumpe der Welt“) verliehen wurde. Das High-Tech-Unternehmen wurde 1995 aus dem Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung ausgegründet und ist im Rossendorfer Technologiezentrum (ROTECH) angesiedelt. Mit dem FZR ist es



---

durch einen Kooperationsvertrag und ein gemeinsames Forschungsprojekt verbunden. Im Dezember 1997 hat das FZR zum ersten Mal Preise für besonders herausragende wissenschaftlich-technische Arbeiten an Mitarbeiter vergeben.

Die Laureaten der Forschungspreise, des Technologiepreises sowie der Doktorandenpreise konnten neben den verliehenen Urkunden auch ein Preisgeld von insgesamt 12000 DM empfangen (s. Seite 12). Diese Arbeiten finden auch Eingang in die Beiträge zu diesem Jahresbe-

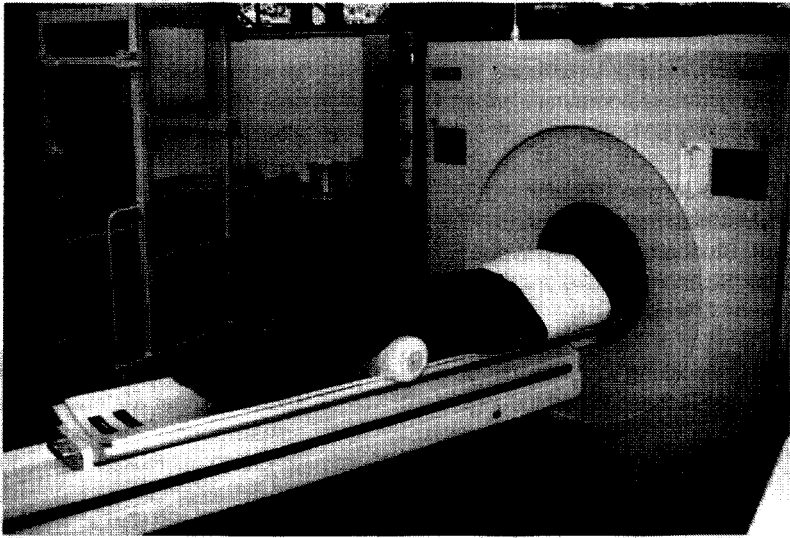
richt, die im Abschnitt „Ereignisse der Forschungsarbeit“ (S. 15 ff.) vorgestellt werden.

Besonders erwähnenswert ist auch das Angebot einer Professur an der angesehenen Notre Dame University in den USA an Dr. Stefan Frauendorf aus dem Institut für Kern- und Hadronenphysik. Desweiteren konnten im Jahr 1997 15 Doktoranden ihre Arbeiten im FZR mit der Promotion abschließen, zu weiteren 52 Promotionsthemen laufen derzeit die Arbeiten.

*F. Pobell, G. Parniewski*

Abb. S. 11  
Positronen-Emissions-Tomographie – PET

Faint, illegible text in the upper left quadrant of the page, possibly bleed-through from the reverse side.



# EREIGNISSE 1997

---



Die Laureaten der Technologie- und Forschungspreise (v.l.n.r.):  
Dr. Büchner, Herr Voigtländer, Dr. Pietzsch, Dr. Scheunemann, Frau Wober,  
Dr. Grundmann, Dr. Rohde

## Forschungs- und Technologiepreise des Forschungszentrums Rossendorf 1997

Der Doktorandenpreis sowie die Forschungs- und Technologiepreise des Forschungszentrums Rossendorf, die besondere wissenschaftliche und technische Leistungen von Mitarbeitern des FZR würdigen, sind im Jahre 1997 erstmals verliehen worden. Besonders hob der Wissenschaftliche Direktor, Prof. Frank Pobell, bei der Überreichung der mit einem Preisgeld verbundenen Urkunden hervor, wie schwierig es für die Jury war, aus der beachtlichen Anzahl der eingereichten hervorragenden Arbeiten und Forschungsergebnisse die Preisträger auszuwählen. So wurden z. B. über den Gewinner des Doktorandenpreises hinaus weitere Doktorarbeiten ausgezeichnet und der Forschungspreis an zwei Arbeitsgruppen vergeben. Die große Zahl und deren hohes wissenschaftliches bzw. technisches Niveau sind ein Spiegel für die Vitalität und hervorragende Qualität der Forschungsarbeit am FZR.

### Forschungspreis 1997

**Herr Dr. Ulrich Grundmann**  
**Herr Dr. Ulrich Rohde**  
(Institut für Sicherheitsforschung)

für die Entwicklung, Validierung und Anwendung des reaktordynamischen Programmpakets DYN3D

**Herr Dr. Hans-Jürgen Pietzsch**  
**Herr Dr. Matthias Scheunemann**  
**Frau Dipl.-Biochem. Jannette Wober**  
(Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie)

für die Entwicklung von serotoninrezeptorbindenden Technetiumverbindungen

### Technologiepreis 1997

**Herr Dr. Andree Büchner**  
**Herr Dipl.-Ing. Jörg Voigtländer**  
(Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik)

für die Entwicklung eines Wirbelstrom-Prüfverfahrens zum Nachweis von Rissen in Rohrfernleitungen mit Hilfe von Inspektionssmolchen

### Doktorandenpreis 1997

**Herr Dr. Michael Jentschel**  
(Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung)

für seine Dissertation: „Crystal-GRID: Eine neue nukleare Sonde zur Untersuchung atomarer Bewegung im Festkörper“

weiterhin ausgezeichnet wurden

**Frau Dr. Susanne Pompe**  
(Institut für Radiochemie)

für ihre Dissertation: „Entwicklung huminsäureähnlicher Melanoidine als Funktionalitätsmodelle für Huminsäuren und ihr Vergleich mit Fluka-Huminsäure hinsichtlich ihres Komplexbildungsverhaltens gegenüber Uran (VI)“

sowie

**Herr Dr. Christof Schneider**  
(Institut für Kern- und Hadronenphysik)

für seine Dissertation: „Untersuchung der Subschwellerzeugung von Kaonen am COSY-ANKE-Spektrometer“

## Feierliche Einweihung des PET-Zentrums Rossendorf

Mit der feierlichen Einweihung des PET-Zentrums Rossendorf (PET: Positronen-Emissions-Tomographie), einer Gemeinschaftseinrichtung des Forschungszentrums Rossendorf und der Technischen Universität Dresden, wurde der Aufbau eines der Großprojekte des FZR vollendet.

In Anwesenheit des sächsischen Staatsministers für Wissenschaft und Kunst, Prof. Dr. Hans Joachim Meyer, dem Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie, Dr. Fritz Schaumann, dem Rektor der TU Dresden, Prof. Dr. Achim Mehlhorn und weiterer international bedeutender Vertreter aus Naturwissenschaft und Medizin erfolgte am 15. Oktober 1997 die vollständige Inbetriebnahme des PET-Zentrums. Dem voraus gingen die Aufnahme des Routinebetriebes des PET-Zyklotrons ab Januar 1997, sowie die Inbetriebnahme der PET-Kamera und der Beginn der diagnostischen Untersuchungen von Patienten ab Mai 1997. Eine wesentliche Voraussetzung dafür war der Erhalt der Genehmigung zum Umgang mit radioaktiven Stoffen für alle Teilbereiche des PET-Zentrums sowie die Erlaubnis für die Herstellung von PET-Radiopharmazeutika, die das Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie ebenfalls im Januar erhielt.



Feierliche Einweihung des PET-Zentrums Rossendorf in Anwesenheit des sächsischen Staatsministers für Wissenschaft und Kunst, Prof. Dr. Hans Joachim Meyer, dem Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie, Dr. Fritz Schaumann, dem Rektor der TU Dresden, Prof. Dr. Achim Mehlhorn und weiterer international bedeutender Vertreter aus Naturwissenschaft und Medizin

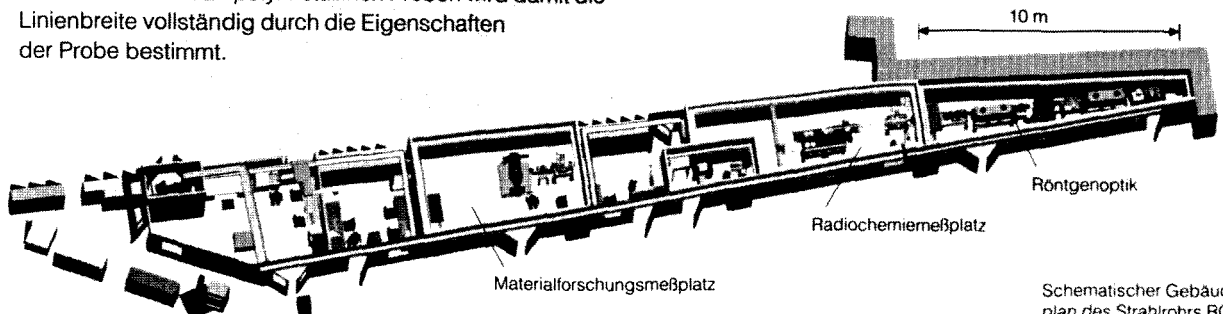
## Erster Synchrotronstrahl an ROBL

Der erste Synchrotronstrahl konnte im Juli 1997 erfolgreich durch die Optik (Blenden, Spiegel, Monochromatoren) der Rossendorfer Beamline (ROBL) an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble „gefädelt“ und im gesamten geplanten Energiebereich von 5 bis 35 keV stabil gehalten werden.

Das Goniometer als Grundausstattung des Materialforschungsmeßplatzes wurde im Herbst 1997 installiert. Erste Testexperimente zum Jahresende zeigten, daß die vorausberechnete Auflösung erreicht werden kann.

Der anlageneigene Beitrag zur Breite von Diffraktionslinien ist mit  $0.006^\circ$  extrem gering.

Für die Diffraktion an polykristallinen Proben wird damit die Linienbreite vollständig durch die Eigenschaften der Probe bestimmt.



Schematischer Gebäudeplan des Strahlrohrs ROBL an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble

Das Grundgerät für den Radiochemiemeßplatz, die Handschuhbox mit Positioniereinheiten für die Detektoren, wurde ebenfalls Ende des Jahres fertiggestellt. Die Möglichkeit auch radioaktive Substanzen, selbst Flüssigkeiten und Gase, an einem modernen Synchrotron zu untersuchen, macht ROBL zu einem weltweit einzigartigen Forschungsgerät.

## Erstes Nutzertreffen für Strahlungsquelle ELBE

Der Aufbau eines supraleitenden Elektronenbeschleunigers hoher Brillanz und niedriger Emittanz (ELBE) zur Erzeugung verschiedenster Arten von Strahlung – Elektronen, Neutronen, Positronen, Röntgen- und vor allem Infrarotlicht – ist gegenwärtig das größte Forschungsprojekt des FZR.

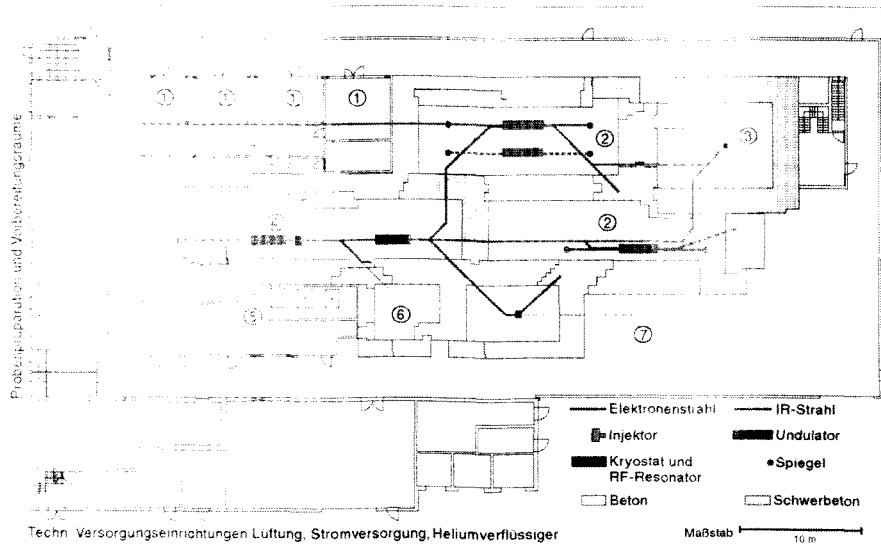
Da der Infrarotstrahl des Freie-Elektronen-Lasers (FEL) an der Strahlungsquelle ELBE nicht nur von verschiedenen Gruppen des FZR genutzt, sondern vor allem auch für Projekte von Gastgruppen zur Verfügung stehen soll, fand am 10. und 11. Dezember 1997 in Rossendorf ein erstes Nutzertreffen mit Wissenschaftlern statt, die an der Vorbereitung von Forschungsprojekten für den ELBE-FEL interessiert sind. Zu der fachübergreifenden Veranstaltung konnten 30 Gastteilnehmer im FZR begrüßt werden.

Der erste Tag stand im Zeichen von Projekten aus der Festkörperphysik und Werkstoffwissenschaft. Dabei wurden insbesondere Experimente mit Infrarotlicht (IR) an Halbleitern, Hochtemperatursupraleitern, dünnen Schichten, Quantenstrukturen und Übergittern vorgestellt. Für viele dieser Untersuchungen ergeben sich wesentliche Vorteile bei der Nutzung des ELBE-FEL. Besonders hervorgehoben wurde die kontinuierliche Durchstimmbarkeit, die einen großen Wellenlängenbereich von 5 bis 150  $\mu\text{m}$  erschließt, sowie die hohe mittlere Leistung und Pulsenergie.

Der Einsatz des ELBE-FEL in der Physikalischen Chemie, Biophysik und Medizin stand am zweiten Tag im Mittelpunkt des Nutzertreffens. Die Teilnehmer hoben ihr großes Interesse an IR-Strahlung mit kurzer Pulsdauer und niedriger Bandbreite bei hoher Intensität hervor sowie die an einem FEL über die Regelung des Elektronenstrahls erreichbare hohe Wellenlängen- und Amplitudenstabilität. Eine FEL-Anlage mit einem Monochromator mit einer Bandbreite von ca.  $10^{-4}$  wäre Fourier-Transformations-Spektrometern insbesondere bei der Untersuchung der Dynamik molekularer Prozesse weit überlegen. Für die Molekül- und Biophysik ist die IR-Spektroskopie bei Wellenlängen  $> 10 \mu\text{m}$ , wie sie durch ELBE möglich wird, besonders interessant. Sie erlaubt z. B. niederfrequente Moden des  $\text{H}_2\text{O}$  zu beobachten, um so die Bindung wichtiger Biomoleküle an und mit Wasser zu studieren – ein lang gehegter Wunsch der Molekularbiologie.

Für viele der an den beiden Tagen diskutierten Projekte ist eine variable Pulsfolge sowie die Synchronisierung der Pulse mit einem konventionellen Kurzzeit-Laser bzw. zwischen Pulsen aus den beiden Undulatoren wünschenswert. Diese und andere bei dem Treffen gestellten Forderungen können durch konstruktive Maßnahmen beim Aufbau von ELBE erfüllt werden. Der sehr intensive Erfahrungsaustausch mit „Infrarot-Experten“ und ihre vielen Anregungen zu Details der Experimentieranlage machten den großen Wert des Nutzertreffens aus, dessen Wiederholung in regelmäßigen Abständen vorgesehen ist.

- 1. Elektronenstrahl
- 2. Injektoren
- 3. FEL-Strahl
- 4. Undulator
- 5. Elektronenstrahl
- 6. Elektronenstrahl
- 7. Elektronenstrahl
- 8. Elektronenstrahl
- 9. Elektronenstrahl
- 10. Elektronenstrahl
- 11. Elektronenstrahl
- 12. Elektronenstrahl
- 13. Elektronenstrahl
- 14. Elektronenstrahl
- 15. Elektronenstrahl
- 16. Elektronenstrahl
- 17. Elektronenstrahl
- 18. Elektronenstrahl
- 19. Elektronenstrahl
- 20. Elektronenstrahl
- 21. Elektronenstrahl
- 22. Elektronenstrahl
- 23. Elektronenstrahl
- 24. Elektronenstrahl
- 25. Elektronenstrahl
- 26. Elektronenstrahl
- 27. Elektronenstrahl
- 28. Elektronenstrahl
- 29. Elektronenstrahl
- 30. Elektronenstrahl





**ERGEBNISSE DER FORSCHUNGSARBEIT**

---

Abb. S. 15  
Auszubildende FrI. Ch. Heidel bei der Fehlersuche an einem elektronischen Verstärker

# RADIOPHARMAZEUTISCHE SONDEN FÜR DIE MEDIZINISCHE DIAGNOSTIK:

## AUF DEM WEGE ZU EINER NEUEN GENERATION VON TECHNETIUM-99M-RADIOPHARMAKA

Hans-Jürgen Pietzsch, Hartmut Spies, Matthias Scheunemann, Peter Brust, Bernd Johannsen

Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie

Kurzlebige radioaktive Isotope (Radionuklide) haben eine große Bedeutung in der medizinischen Diagnostik. Dabei werden diese Radionuklide in spezielle, z. T. sehr komplexe chemische Verbindungen eingebaut und, nachdem sie aufbereitet und geprüft wurden, als sogenannte Radiopharmaka eingesetzt. Diese Radiopharmaka werden in den jeweils zu untersuchenden Organen in charakteristischer Weise verteilt, angelagert oder verstoffwechselt. Die Verteilung des Radiopharmakons kann über die nach außen dringende Strahlung mit einer speziellen Kamera gemessen und bildlich dargestellt werden. Aufgrund der besonderen physiologischen Selektivität dieses bildgebenden Verfahrens erschließen sich dem Arzt eine Reihe neuer, mit anderen Methoden nicht zu realisierender Diagnosemöglichkeiten in der Medizin. Er kann z. B. frühzeitig feststellen, ob sich am Skelettsystem Metastasen eines bösartigen Tumors angesiedelt haben.

### Technetium-99m – das Arbeitspferd der Nuklearmedizin

Das in der nuklearmedizinischen Diagnostik am häufigsten genutzte Nuklid ist das Technetium-99m. Gegenwärtig werden mehr als 80% aller nuklearmedizinischen Untersuchungen in Deutschland mit diesem Isotop durchgeführt. Man kann es deshalb mit Recht als die Basis der Nuklearmedizin bezeichnen. Technetium-99m ist ein Tochternuklid von Molybdän-99 (Abbildung 1). Das Mutternuklid wird vorzugsweise durch Neutronenbestrahlung von Uran im Reaktor gewonnen. Aus den entstehenden Uranspaltprodukten wird das Molybdän-99 („Spaltmolybdän“) durch chemische Aufarbeitung isoliert. Technetium-99m ist der metastabile angeregte Zustand des Technetiums-99. Beim Übergang in seinen sehr langlebigen Grundzustand besitzt es für die medizinische Anwen-

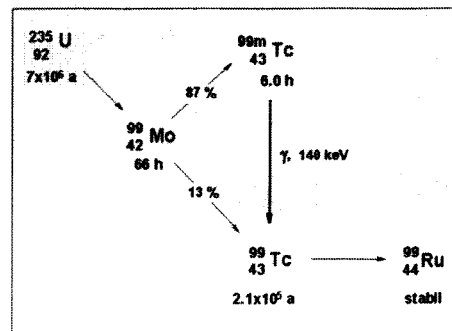


Abb. 1  
Zerfallsschema von Technetium-99m  
Für die medizinische Diagnostik wird das ausgesendete  $\gamma$ -Quant (hier rot dargestellt) des Übergangs des Technetiums aus seinem vergleichsweise kurzlebigen angeregten, metastabilen Zustand  $^{99m}\text{Tc}$  in seinen Grundzustand verwendet.

dung ideale strahlenphysikalische Eigenschaften. Es ist ein reiner  $\gamma$ -Strahler mit einer meßtechnisch idealen Energie von 140 keV. Die den Organismus schädigende  $\beta$ - bzw.  $\alpha$ -Strahlung tritt nicht auf. Außerdem besitzt das Radionuklid eine kurze Halbwertszeit von 6 Stunden, die für die medizinische Untersuchung völlig ausreicht, die Strahlenbelastung des Patienten aber gering hält. Aufgrund dieser kurzen Halbwertszeit kann Technetium-99m jedoch nicht wie längerlebige Nuklide – z. B. Jod-131 – vom „Lager“ geliefert werden. Es ist aber mit Hilfe von  $^{99}\text{Mo}/^{99m}\text{Tc}$ -Generatoren täglich direkt in der nuklearmedizinischen Klinik in sehr einfacher Weise und zu vergleichsweise niedrigen Kosten zu gewinnen. Die Abbildung 2 illustriert das Funktionsprinzip eines solchen Generators.

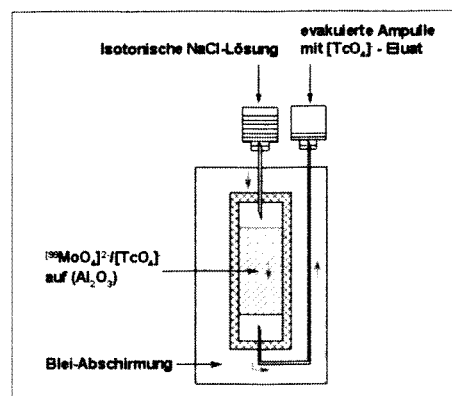
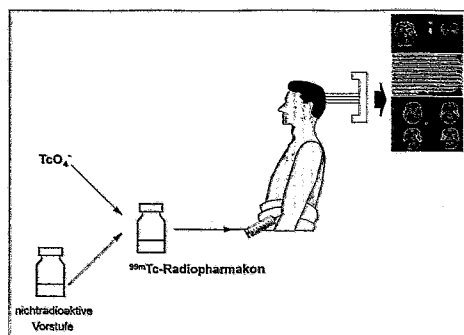


Abb. 2  
Funktionsschema eines  $^{99}\text{Mo}/^{99m}\text{Tc}$ -Generators  
Es wird das Prinzip der Säulenchromatographie genutzt. Dabei ist das Mutternuklid  $^{99}\text{Mo}$  als  $[\text{MoO}_4]^{2-}$  auf Aluminiumoxid fest gebunden, während das gebildete Tochternuklid  $^{99m}\text{Tc}$  als Pertechnetat,  $[\text{TcO}_4]^-$ , nicht am Aluminiumoxid haftet. Es kann in regelmäßigen Abständen mit Natriumchloridlösung von der Säule gewaschen werden.



Das so gewonnene aktive Technetium wird mit einer nicht radioaktiven Vorstufe eines Radiopharmakons vermischt und so zum eigentlichen Radiopharmakon umgesetzt, das bei einer nuklearmedizinischen Untersuchung nach dem in Abbildung 3 gezeigten Prinzipschema eingesetzt wird.

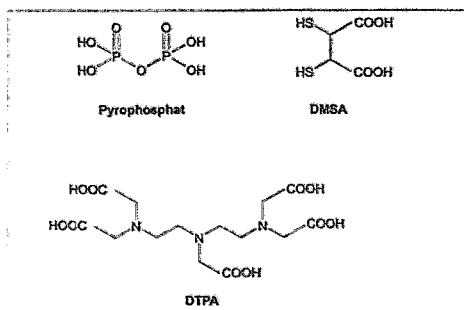
**Abb. 3**  
Prinzipschema einer nuklearmedizinischen Untersuchung mit Technetium-99m  
Pertechnetat,  $TcO_4^-$ , wird mit einer nichtradioaktiven Vorstufe eines Radiopharmakons vermischt und so zum eigentlichen  $Tc$ -Radiopharmakon umgesetzt.  
Nach Injektion in die Blutbahn verteilt es sich in charakteristischer Weise, z. B. im Gehirn. Die nach außen dringende Strahlung kann mit einer speziellen Kamera gemessen und bildlich dargestellt werden.



### Technetium-99m-Komplexe in der Nuklearmedizin

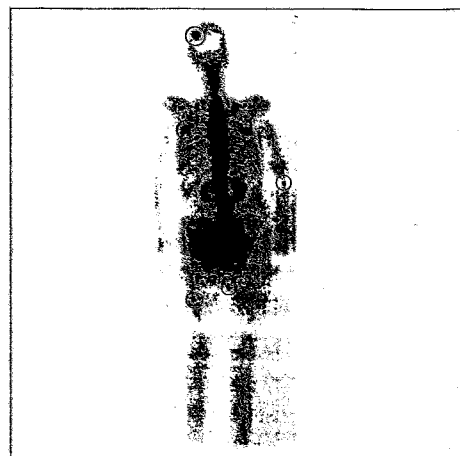
Die erste Generation klinisch genutzter Technetium-99m-Komplexe leitete sich von bekannten Komplexbildnern wie der Dimercaptobernsteinsäure (DMSA), der Diethylen-triamin-pentaessigsäure (DTPA) oder dem Pyrophosphat ab (vgl. Abbildung 4).

**Abb. 4**  
Einige Liganden, die in den 1960er Jahren für die Entwicklung von  $^{99m}Tc$ -Komplexen etabliert wurden.



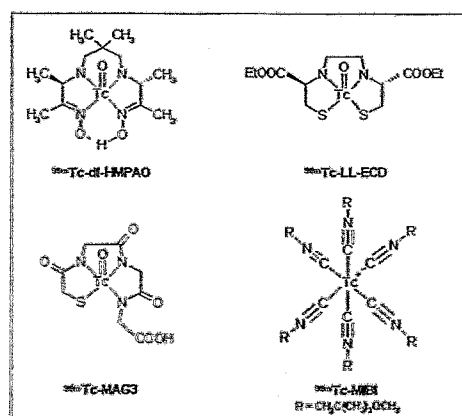
$^{99m}Tc$ -DMSA und  $^{99m}Tc$ -DTPA werden bevorzugt über die Niere ausgeschieden und gestatten Aussagen zur Funktion dieses Organs. Die heute noch eingesetzten Technetium-99m-Komplexe mit Phosphonaten ermöglichen die bildliche Darstellung des Skeletts, z. B. bei der Suche nach Tumormetastasen (Abbildung 5).

Obwohl eine beträchtliche Anzahl weiterer Substanzen (Proteine, Zellen, Blutbestandteile) mit Technetium-99m markiert werden konnten, bestanden doch wesentliche Unklarheiten über die



**Abb. 5**  
Tumormetastasen eines Patienten  
Deutlich sind die hier rot eingekreisten Metastasen im Skelett eines Patienten zu identifizieren.

Struktur der Komplexe sowie die chemischen und pharmakologischen Gesetzmäßigkeiten innerhalb dieser Klasse von Radiopharmaka. Um die Entwicklung neuer Technetium-99m-Tracer auf eine wissenschaftliche Grundlage zu stellen und ein gezieltes Design zu ermöglichen, begannen in den 80er Jahren systematische Arbeiten zur Koordinationschemie des Technetiums. Umfangreiche Untersuchungen zu den optimalen Ligandensystemen, den wesentlichen Oxidationsstufen und zur Struktur der Komplexe (Charakterisierung mittels NMR und Röntgenstrukturanalyse) führten zur Entwicklung kleiner, symmetrischer Moleküle mit relativ einfachen Liganden. In Abbildung 6 sind die wichtigsten Vertreter zusammengefasst.



**Abb. 6**  
Technetium-99m-Komplexe, die in den 80er Jahren für die Untersuchung des Hirns ( $^{99m}Tc$ -di-HMPAO;  $^{99m}Tc$ -LL-ECD), der Nieren ( $^{99m}Tc$ -MAG3) und des Herzens ( $^{99m}Tc$ -MIBI) entwickelt wurden.

Diese 2. Generation klinisch genutzter Technetium-99m-Komplexe erschließt Organe, die durch die bisherigen Technetiumpharmaka nicht zugänglich waren, z. B. den Herzmuskel oder das durch die Blut-Hirn-Schranke gut abgeschirmte Gehirn (Abbildung 7).

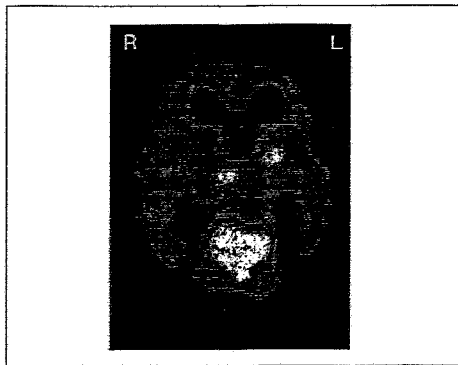


Abb. 7  
Messung der regionalen Durchblutung des Gehirns  
Nachweis mit  $^{99m}\text{Tc}$ -HMPAO-Komplex

### In vivo reaktive $^{99m}\text{Tc}$ -Komplexe – Die 3. Generation von Tc-Radiopharmaka

Fortschritte der Biowissenschaften führten in den letzten Jahren immer mehr zu einer molekularen Betrachtungsweise in der Medizin. Mit Hilfe neuer radioaktiver Moleküle im Sinne von molekularen Sonden werden diagnostisch relevante „Reporter-moleküle“, wie z. B. Rezeptoren im Organismus, erkannt und analysiert. Vor allem die Positronen-Emissions-Tomographie (PET) mit radioaktiven Biomolekülen hat zu einem revolutionierenden Fortschritt im Verständnis von Informationsprozessen im gesunden und kranken Menschen geführt. Für deren Anwendung ist allerdings eine kosten- aufwendige Infrastruktur erforderlich. Das volle Potential der PET wird daher auch in Zukunft nur in wenigen Zentren verfügbar sein. Demgegenüber ist die Single-Photon-Emissions-Computer-Tomographie (SPECT) mit  $\gamma$ -strahlenden Isotopen das Routinehandwerkzeug jedes Nuklearmediziners. Der mit PET erzielte wissenschaftliche Vorlauf soll in Zukunft auch in der breiten medizinischen Diagnostik unter Nutzung des nuklearmedizinisch idealen Strahlers Technetium-99m umgesetzt werden. Die große wissenschaftliche Herausforderung dieser Zielstellung liegt darin, den grundsätzlich unphysiologischen Komplexen dieses Metalls eine solche Gestalt, Größe und

Reaktivität zu verleihen, daß sie Biomoleküle ausreichend imitieren können.

Da Technetium nicht wie Fluor oder Jod direkt an organische Moleküle gebunden werden kann, sind spezielle Komplexbildner (Liganden) notwendig, die die Bindung vermitteln. Diese Liganden führen aber meist zu einer starken Verfremdung des ursprünglichen Biomoleküls (vgl. Abbildung 8). Die Aufgabe des Chemikers ist es nun, die „Störung“ des Bioverhaltens gering zu halten und trotzdem eine stabile Bindung des Metalls an das Biomolekül zu gewährleisten.

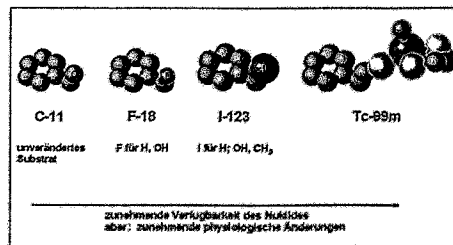


Abb. 8  
Verfremdung eines organischen Moleküls durch dessen Markierung mit positronen- oder gammastrahlenden Radionukliden. Während Fluor und Jod direkt an ein Biomolekül gebunden werden können, sind für das Metall Technetium spezielle Komplexbildner (Liganden) erforderlich.

### Chemische Bausteine für das Tracerdesign

Für die Entwicklung biochemisch akzeptabler Technetiumkomplexe werden verschiedene chemische Bausteine benötigt:

- eine geeignete Technetium-Vorstufe
- Komplexbildner zur stabilen Bindung des Metalls an das Biomolekül
- Leitstrukturen, um die zunächst inerten Technetiumkomplexe durch Funktionalisierung in vivo reaktiv zu machen

Hinsichtlich der Verknüpfung des Technetiums mit dem Biomolekül lassen sich zwei Ansätze unterscheiden (Abbildung 9):

1. der weitgehende Einbau des Metalls in das Biomolekül und
2. die Kopplung des Metalls an das organische Molekül über spezielle Ankergruppen.

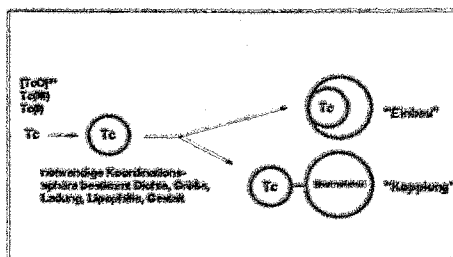
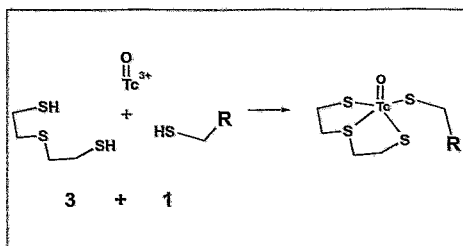


Abb. 9  
Bausteine und Etappen bei der Entwicklung in vivo reaktiver Technetium-99m-Tracer. Das Metall wird entweder direkt in das Biomolekül eingebaut oder über spezielle Ankergruppen an das organische Molekül gekoppelt. In jedem Fall müssen die in freier Form nicht existenzfähigen Metallionen in eine maßgeschneiderte Ligandenhülle (rote Kreise) eingepaßt werden.

Abb. 10  
„3+1“-Gemischtligand-Konzept für die Synthese biochemischer Technetium-99m-Komplexe. Ein Ligand mit drei Bindungsstellen sowie ein Ligand mit einer Bindungsstelle reagieren gleichzeitig mit dem Metall. Der Rest R symbolisiert ein Biomolekül oder ein Biomolekülfragment.



Wir haben in Rossendorf mit dem „3+1“-Konzept eine Strategie zur rationellen Synthese neuer Technetiumkomplexe entwickelt (Abbildung 10). Dabei reagieren ein Komplexbildner (Ligand) mit drei Bindungsstellen sowie ein Ligand mit einer Bindungsstelle gleichzeitig mit dem Metall unter Bildung sogenannter Gemischtligandkomplexe. Charakteristisch für diese Verbindungen ist, daß sie als Träger von Biomolekülen (R) bzw. Biomolekülfragmenten hervorragend geeignet sind.

Mit der Anwendung des neuen Synthesepinzips sind folgende Vorteile verbunden: Rationelle Herstellungsweise, hohe Anwendungsbreite, Minimierung des Störeffektes, den die Metall-Ligand-Einheit auf das Biomolekül ausübt, Steuerung der Komplexlipophilie über den Liganden. Außerdem werden keine Stereoisomeren bei der Komplexbildung gebildet. Dies ist ein wesentlicher Vorteil gegenüber tetradentaten Komplexbildnern, bei denen syn-anti-Isomere mit in der Regel unterschiedlichem biologischen Verhalten gebildet werden.

#### Technetium-99m-Komplexe zur Abbildung von Serotoninrezeptoren im Gehirn

Unserem heutigen Verständnis der Funktionsweise von Nervensystemen liegt das Konzept zugrunde, daß Nervenzellen über sogenannte Synapsen miteinander kommunizieren, indem sie chemische Überträgersubstanzen (Botenstoffe, Neurotransmitter) ausschütten, die sich an spezielle Rezeptoren auf den Synapsen binden (Abbildung 11). Diese Rezeptoren sind große, komplexe Proteinmoleküle, deren genaue chemische Struktur sich nur schwer bestimmen läßt. Bei den Neurotransmittern handelt es sich meist um relativ kleine organische Moleküle, z. B. Serotonin oder Dopamin. Aufgrund seiner Form und anderer Eigenschaften paßt ein bestimmtes Neurotransmittermolekül in seinen Rezeptor wie ein Schlüssel zum Schloß.

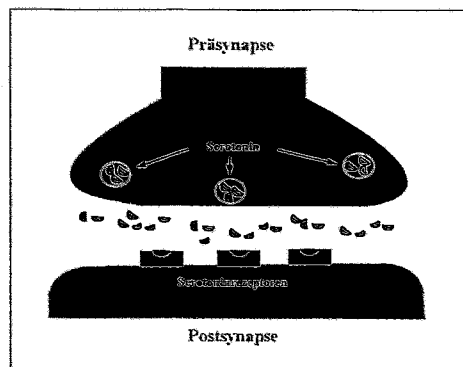


Abb. 11  
Nervenzellen kommunizieren miteinander über sogenannte Synapsen, indem sie chemische Überträgersubstanzen (z. B. Serotonin) ausschütten, die sich an spezielle Rezeptoren auf den Synapsen binden. (nach R.F. Thompson, Das Gehirn, Spektrum-Verlag Heidelberg, 1994)

Die Neigung eines Transmitters, sich mit seinem Rezeptor zu verbinden, bezeichnet man als Affinität. Als Maß für diese Affinität wird in der Biochemie der  $IC_{50}$ -Wert bestimmt. Er gibt die Konzentration an, bei der der Neurotransmitter 50 % seiner pharmakologischen Wirkung entfaltet. Je wirksamer eine Substanz ist, um so niedriger ist diese Konzentration. Für hochaffine Botenstoffe sind das üblicherweise Bereiche zwischen  $10^{-9}$  und  $10^{-10}$  mol/l. Die obigen Betrachtungen zum Neurotransmitter gelten in gleicher Weise auch für die Wirkung eines Medikaments oder einer Droge (z. B. Heroin) auf einen Rezeptor. Indem sie die Rezeptoren täuschen und sich gewissermaßen als Neurotransmitter ausgeben, üben sie schon in sehr geringen Dosen starke Einflüsse auf Gehirn und Verhalten aus.

Wir haben in Rossendorf das Ziel, mit Technetiumkomplexen den Neurotransmitter Serotonin zu imitieren und die Konzentration und Verteilung der Serotoninrezeptoren im Gehirn zu messen und bildlich darzustellen. Das ist aus medizinischer Sicht von großem Interesse, da Erkrankungen wie Depressionen oder Angstzustände mit Veränderungen an diesen Neurorezeptoren verbunden sind. Bei der Konzipierung rezeptorbindender Technetiumkomplexe verfolgen wir den Ansatz, bekannte, hochspezifische organische Rezeptorpharmaka als Leitstrukturen zu nutzen. Auf der Basis von Ketanserin und Cisapride (Abbildung 12) entwickelten wir neuartige Technetiumkomplexe mit hoher Affinität zum Serotonin-  $5HT_{2A}$ -Rezeptor.

Zunächst wurde die pharmakophore Gruppe abgeleitet, d. h. die Grundbausteine, die für die pharmakologische Wirkung essentiell sind. Diese pharmakophore Gruppe besteht aus zwei aromatischen Einheiten und einem basischen Stickstoffatom, die über Kohlenstoffketten unterschiedlicher Länge („spacer“) miteinander verbunden sind.

Einer der Aromaten des Pharmakophors wird durch eine Technetium-Ligand-Einheit ersetzt und der für die Rezeptorbindung essentielle Teil der Leitstruktur mit einem endständigen Schwefelatom versehen. Die Kombination dieses einzähnigen Liganden mit einem dreizähnigen Komplexbildner ergibt nach dem „3+1“-Konzept neutrale Technetiumkomplexe.

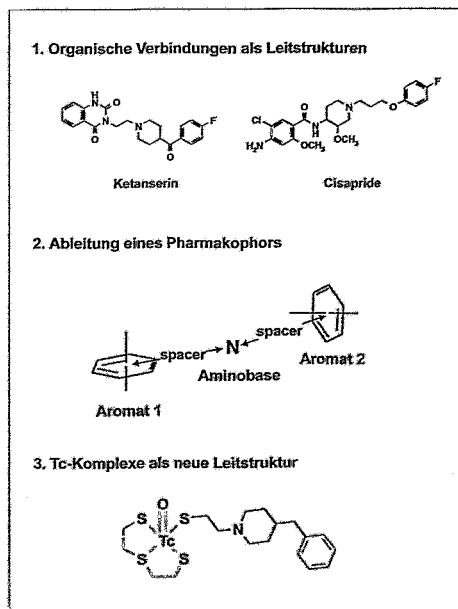


Abb. 12  
Von biochemischen Leitstrukturen zu prototypischen Technetiumkomplexen  
Die für die Rezeptorbindung essentiellen Bestandteile der organischen Moleküle findet man in den Technetiumverbindungen wieder. Der Aromat 1 wurde durch die Technetium-Ligand-Einheit ersetzt. Durch Variationen in der Seitenkette können die Komplexe hinsichtlich einer hohen Rezeptoraffinität optimiert werden.

Die Röntgenstrukturanalyse eines analogen Rheniumkomplexes (als nichtradioaktives Modell für Technetium) zeigt die für diesen Komplex typische quadratisch-pyramidale Struktur der Metall-Ligand-Einheit (Abbildung 13).

Wie wir mit Hilfe von moleküldynamischen Simulationen zeigen konnten, gewährleistet die flexible Seitenkette der Komplexe, daß sich die

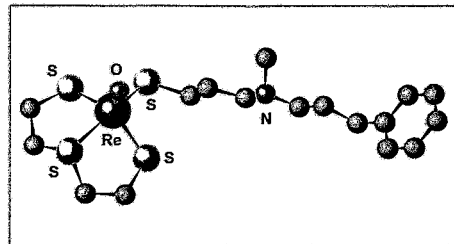


Abb. 13  
Molekülstruktur eines rezeptorbindenden Rheniumkomplexes als Modell für die analogen Technetiumverbindungen. Gut erkennbar ist die für diesen Komplex typische quadratisch-pyramidale Struktur der Metall-Ligand-Einheit.



Abb. 14  
Moleküldynamische Simulation eines Technetiumkomplexes in der Bindungstasche eines Serotonin-5-HT<sub>2A</sub>-Rezeptormodells (nach H.-D. Höltje et al., Jahresbericht 1997 Inst. f. Bioanorg. Chemie). Über die flexible Seitenkette kann sich der Komplex nach dem Schlüssel-Schloß-Prinzip gut in die Bindungstasche des Rezeptors einpassen.

Verbindungen nach dem Schlüssel-Schloß-Prinzip gut in die Bindungstasche des Rezeptors einpassen können (Abbildung 14).

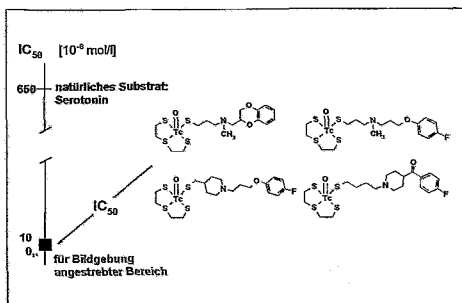
Ein Technetiumtracer, der in die Blutbahn injiziert wurde, begegnet auf seinem Weg zum Zielorgan (Gehirn) und Zielmolekül (Serotoninrezeptor) einer Fülle von potentiellen Bindungspartnern, z. B. Proteinen oder anderen Rezeptortypen. Zu diesen Konkurrenten besteht zwar keine hohe Affinität, aber wegen ihrer beträchtlichen Konzentration können sie den Tracer trotzdem zum großen Teil binden. Um ein hohes Verhältnis zwischen Zielrezeptor und Untergrund, d. h. kontrastreiche Bilder zu erzielen, muß die Affinität des Technetiumkomplexes zum Rezeptor extrem hoch sein und eine klare Abgrenzung gegen andere Rezeptortypen ermöglichen.

Durch Struktur-Affinitäts-Studien innerhalb einer großen Serie systematisch variiert Verbindungen konnten wir die erste Leitstruktur für serotoninrezeptorbindende Technetiumkomplexe ableiten. Sie wurde hinsichtlich einer hohen Rezeptoraffinität optimiert.

Es gelang:

1. der Nachweis der prinzipiellen Machbarkeit unseres Konzeptes durch Erreichen des IC<sub>50</sub>-Wertes für den natürlichen Neurotransmitter Serotonin und
2. die weitere Erhöhung der Affinität in den für die Bildgebung angestrebten Bereich zwischen 10<sup>8</sup> und 10<sup>9</sup> mol/l. Besonders interessante Kandidaten sind in Abbildung 15 dargestellt.

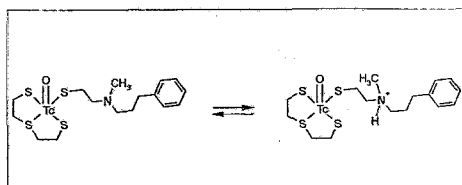
Abb. 15  
Technetiumkomplexe mit  $IC_{50}$ -  
Werten, im logarithmischen  
Maßstab, im für die Bildgebung  
angestrebten Bereich zwischen  
 $10^{-8}$  und  $10^{-9}$  mol/l.



Damit die Technetiumkomplexe im Gehirn an Rezeptoren binden können, müssen sie zuvor die bereits erwähnte Blut-Hirn-Schranke überwinden; eine sehr wirksame Barriere aus spezialisierten Zellen, die das Gehirn vor schädlichen Substanzen schützt. Hier erweist sich der Stickstoff in der Seitenkette der Komplexe als besonders problematisch. Einerseits ist er essentiell für eine hohe Rezeptoraffinität, andererseits behindert er die Passage durch die Blut-Hirn-Schranke, und zwar auf folgende Weise:

Aufgrund seiner Basizität ist der Stickstoff bei physiologischem pH – also 7,4 – fast vollständig protoniert, d. h. die Verbindungen liegen als Kationen im Blut vor (Abbildung 16).

Abb. 16  
Protonierungsgleichgewicht  
rezeptorbindender  
Technetiumkomplexe  
Bei physiologischem pH  
sind die Komplexe im Blut  
fast vollständig protoniert  
(rechte Seite des Gleich-  
gewichtes). Da jedoch nur  
neutrale Verbindungen  
(linke Seite des Gleich-  
gewichtes) die Blut-Hirn-  
Schranke überwinden  
können, steht nur ein  
geringer Anteil der  
verabreichten Komplex-  
menge für die Rezeptor-  
bindung im Gehirn zur  
Verfügung.



Es können jedoch nur neutrale Substanzen die Blut-Hirn-Schranke überwinden. Damit steht nur ein sehr geringer Anteil der verabreichten Komplexdosis für die Rezeptorbindung im Gehirn zur Verfügung.

Von diesen Zusammenhängen ausgehend, entwickelten wir die Arbeitshypothese, daß die sehr geringe Aufnahme der Technetiumtracer in das Gehirn dadurch verbessert werden kann, indem man die Basizität des Stickstoffs absenkt. Das mußte aber mit Augenmaß geschehen, weil sonst der Verlust der Affinität zu erwarten war. Es gelang uns in der Tat, diesen „Zielkonflikt“ durch Einführung von Sauerstoffatomen in die Nachbarschaft zum Stickstoff zu lösen. Die Affinität der Verbindungen zum Serotoninrezeptor bleibt vollständig erhalten. Abbildung 17 illustriert die deutliche Erhöhung

der Aufnahme der Komplexe und damit der Radioaktivität in das Rattenhirn mit sinkender Basizität des Stickstoffs.

	pK-Wert	Hirnaufnahme (% Dosis, 2' p.l.)
	9,5 - 10,0	0,3 - 0,5
	8,3	2,1

Abb. 17  
Zusammenhang zwischen der Basizität des für die Rezeptor-  
bindung notwendigen Stickstoffatoms, ausgedrückt als pK-  
Wert, und der Aufnahme der Komplexe in das Rattenhirn.  
Die Absenkung der Basizität des Stickstoffs bewirkt eine  
deutliche Erhöhung der Aufnahme der Komplexe und somit  
des Kontrastes im bildgebenden Verfahren.

### Zusammenfassung

Die moderne medizinische Diagnostik stellt an den Technetium-Chemiker die faszinierende Herausforderung, eine neue Art von Technetiumkomplexen zu entwickeln, die wie organische Pharmaka sehr spezifisch an biologische Zielmoleküle, z. B. Neurorezeptoren, binden und diese damit einer bildgebenden Diagnostik zugänglich machen. Ein am Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie entwickeltes Synthesekonzept für Technetiumkomplexe bietet dafür einen neuen Ansatzpunkt, indem es Technetiumverbindungen ermöglicht, die asymmetrische Molekülstrukturen besitzen. Diese Substanzen können so verändert werden, daß sie exakt in die Bindungstasche eines Rezeptors passen, der ansonsten nur organische Moleküle erkennt und bindet. Obwohl die für eine hohe Bindungsfähigkeit essentiellen Strukturelemente in den Komplexen deren Aufnahme in das Gehirn behindern, konnte durch Moleküloptimierung ein guter Kompromiß zwischen Bindung an den Rezeptor und Fähigkeit zum Durchtritt durch die Blut-Hirn-Schranke erreicht werden.

Nachdem wir die prinzipielle Bindungsfähigkeit der von uns entwickelten Technetiumkomplexe nachgewiesen haben, ist es nun Gegenstand unserer weiteren Arbeiten, das Verhalten der Verbindungen im Organismus in seiner Gesamtheit von Verteilung, Anreicherung und Ausscheidung zu optimieren.

# IONENSTRAHLSYNTHESE VON HALBLEITER-NANOCLUSTERN FÜR ELEKTROOPTISCHE ANWENDUNGEN

- UND ES LEUCHTET DOCH... ! BLAUE LUMINESZENZ AUS SI-STRUKTUREN -

Johannes von Borany, Rainer Grötzschel, Karl-Heinz Heinig, Andreas Markwitz, Wolfgang Matz, Lars Rebohle, Bernd Schmidt, Wolfgang Skorupa, Matthias Strobel

Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung

## Motivation und Zielstellung

Folgt man der Mikroelektronik-Roadmap<sup>1)</sup>, so wird die einzigartige Stellung des Siliziums als Materialbasis der Informationstechnik auch in absehbarer Zukunft erhalten bleiben. Im Gegensatz dazu dominieren in der Optoelektronik III-V-Halbleiter, optische Ferroelektrika oder Polymere. Aktive optische Bauelemente aus Silizium (Si) bzw. Germanium (Ge) beschränken sich derzeit auf opto-elektrische Wandler wie CCD-Sensoren, Fotodioden und -transistoren, Solarzellen oder spezielle Strahlungsempfänger. Dies ist auf zwei grundlegende Eigenschaften der elementaren Halbleiter zurückzuführen: Si und Ge sind indirekte Halbleiter mit relativ geringem Bandabstand. Indirekte Halbleiter sind dadurch charakterisiert, daß Valenzbandmaximum und Leitungsbandminimum im Impulsraum nicht übereinander liegen und damit strahlende Übergänge von Leitungsbandelektronen in das Valenzband wegen der notwendigen Beteiligung von Phononen kaum auftreten. Da zudem infolge des geringen Bandabstandes (Si: 1,12 eV, Ge: 0,66 eV) Lumineszenz energetisch nur im infraroten Bereich ( $\lambda > 1,2 \mu\text{m}$ ) möglich ist, scheiden Si und Ge als effektive Lichtemitter für den sichtbaren Wellenlängenbereich aus.

Seit etwa 10 Jahren gibt es verstärkte Bemühungen, die Kompatibilität von Mikroelektronik und Optoelektronik hinsichtlich der Materialbasis und der technologischen Prozesse bei der Bauelementherstellung zu verbessern. Das zunächst angestrebte Ziel ist die Entwicklung integrierbarer Schnittstellen für die wechselseitige Wandlung optischer und elektrischer Signale auf mikroelektronischen Si-Chips. Erwähnt werden sollen hier die Arbeiten zur monolithischen Integration von GaAs-Lichtemittern auf Si-Substraten oder das von Lucent Technologies in den USA mit großem Aufwand vorangetriebene Projekt zur Inte-

gration spezieller Laserdioden auf VLSI-Si-Mikroprozessoren mittels einer Flip-Chip-Bond-Technologie. Hintergrund all dieser Entwicklungen ist der drängende Bedarf an optoelektronischen Schnittstellen (OIC: Optical Interconnects) für die Interchip-Kommunikation. Der „Flaschenhals“ bei der Signalverarbeitung in einem modernen Computer beispielsweise ist längst nicht mehr die Prozessorleistung, sondern vielmehr der Datentransfer zwischen Prozessor und verschiedenen Speicherbausteinen. OIC's sollen zu Beginn des nächsten Jahrtausends eine signifikante Steigerung der Übertragungsraten bis in den Bereich einiger 100 Gbit/s ermöglichen.<sup>2)</sup>

Auf diesem Hintergrund sind auch neue Ansätze zur Erzeugung von Lumineszenz-Bauelementen auf der Basis von Si-Strukturen zu sehen. Auslöser dieser Renaissance der „Silicon-Based-Light-Emission“ war die 1990 veröffentlichte Entdeckung des Briten Canham, daß poröses Si – erzeugt mittels eines elektrochemischen Ätzprozesses an der Oberfläche einer Si-Scheibe – rotes Licht im Bereich um 800 nm emittiert. Die Intensität und die Wellenlänge der Lumineszenz korrelierte mit der Ätzzeit, d. h. mit der Anzahl und der Größe der freigeätzten Strukturen in der porösen Si-Schicht. Man fand bald heraus, daß diese Lumineszenz eine charakteristische Eigenschaft sehr kleiner Halbleiterstrukturen mit Abmessungen im Bereich weniger Nanometer (Si:  $< 5 \text{ nm}$ ) darstellt. Werden Elektronen in solchen Volumina festgehalten, so sind für sie nur noch wenige Energieniveaus erlaubt, deren Abstand mit abnehmender Clustergröße zunimmt (Quantum-Confinement). Dies führt u. a. zu einer Vergrößerung der Energiedifferenz zwischen Leitungs- und Valenzband, wodurch eine Lumineszenz für Si nun auch bei höheren Energien im sichtbaren Wellenlängenbereich möglich wird.

1)  
Die Mikroelektronik-Roadmap ist eine von der Fa. SEMATECH (USA) herausgegebene, kontinuierlich aktualisierte Prognosestudie zur Entwicklung der Mikroelektronik und deren Material- und Technologiebasis über einen Zeitraum von ca. 15 Jahren.

2)  
Mit einer Übertragungsrate von 100 Gbit/s ist die Übertragung eines Satellitenbildes einer Fläche  $100 \text{ km} \times 100 \text{ km}$  mit einer Ortsauflösung von 1 m und einer Farbtiefe von 10 bit innerhalb einer Sekunde möglich.

Neben dem porösen Silizium wurden in den letzten Jahren weitere Möglichkeiten zur Realisierung lumineszierender Si-Strukturen gefunden. Dazu zählen insbesondere:

- $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  Quantendot-Strukturen,
- fremdatomaktivierte optische Übergänge (Bsp.: Erbium-dotiertes Si; die Emissionswellenlänge von 1,5  $\mu\text{m}$  erlaubt eine ideale Anpassung an das Dämpfungsminimum optischer Glasfaserkabel),
- Halbleiter-Nanocluster.

Der letztgenannte Ansatz geht von der Vorstellung aus, daß die beim porösen Silizium festgestellten Lumineszenzeffekte auch bei nanoskaligen Strukturen auftreten sollten, die in Form von Halbleiterclustern in eine Festkörpermatrix eingebettet sind. Die nachfolgenden Ausführungen sollen die in den letzten zwei Jahren im FZR gewonnenen Erkenntnisse bei der Ionenstrahlsynthese von Halbleiterclustern (Si, Ge) in thermischen  $\text{SiO}_2$ -Schichten resümieren. Unter Verwendung derartiger clusterhaltiger Schichten gelang es erstmalig, auf der Basis von Si-Strukturen eine intensive Lumineszenz im violetten / blauen Spektralbereich zu erzeugen.

#### Ionenstrahlsynthese von Halbleiterclustern in dielektrischen Schichten

Aus technologischer Sicht besteht die Ionenstrahlsynthese (IBS: Ion Beam Synthesis) im wesentlichen aus der Kombination einer Ionenimplantation und einer thermischen Behandlung (Abbildung 1). Auf einem Si-Substrat wird durch thermische Oxidation in einer sauerstoffhaltigen Atmosphäre eine (amorphe)  $\text{SiO}_2$ -Schicht (Dicke: 100 bis 500 nm) erzeugt. In das  $\text{SiO}_2$  wird nachfolgend durch einen Implantationsschritt Si oder Ge eingebracht. Die Implantationsparameter (Energie, Fluenz) werden dabei so gewählt, daß eine Fremdatomkonzentration von einigen at.-% im Maximum des Implantationsprofils (z.B. in der Mitte der  $\text{SiO}_2$ -Schicht) erreicht wird, welche die Gleichgewichtslöslichkeit für das implantierte Element in der Matrix überschreitet. Der IBS-Prozeß wird mit einem Tempereschritt (500-1100 °C) abgeschlossen, der zwei Funktionen erfüllt:

- die weitgehende Wiederherstellung des durch den Implantationsprozeß stark gestörten  $\text{SiO}_2$ -Netzwerkes,
- Keimbildung und Wachstum von Si- oder Ge-Nanoclustern.

Im Ergebnis der IBS entwickeln sich aus einer ursprünglich nahezu gaußförmigen Implantationsverteilung ein Ensemble diskreter Si- bzw. Ge-Nanocluster, die vollständig in der  $\text{SiO}_2$ -Schicht eingebettet sind.

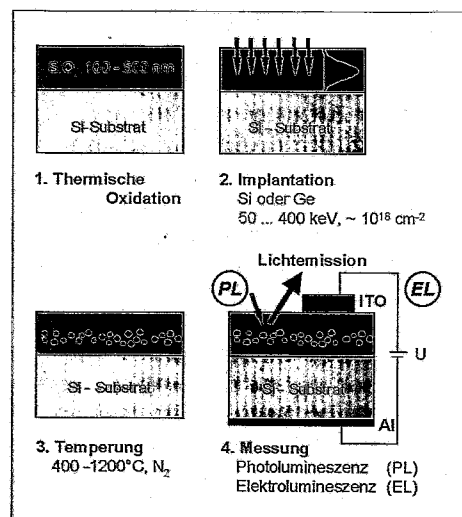


Abb. 1 Schematische Darstellung der Erzeugung von Halbleiter-Nanoclustern durch die Ionenstrahlsynthese In eine dünne  $\text{SiO}_2$ -Schicht auf einem Si-Substrat (1) werden Si- oder Ge-Ionen implantiert (2). Während des nachfolgenden Tempereschrittes (3) entstehen die Halbleiter-Nanocluster. Die Lichtemission (3) aus diesen nanoclusterhaltigen  $\text{SiO}_2$ -Schichten kann elektrisch (EL) oder optisch (PL) ange regert werden. (4)

Das IBS-Verfahren ist von seiner präparativen Seite her denkbar einfach und weist eine Reihe von Vorteilen auf:

- Der Implantationsprozeß gestattet es, Art, Menge und Position der Fremdatome in der Matrix genau festzulegen, was eine sehr gute Prozeßkontrolle ermöglicht.
- Durch die Einbettung in eine „neutrale“ dielektrische Matrix wird ein hoher Grad an thermischer, chemischer und mechanischer Stabilität der Nanocluster in bezug auf nachfolgende Präparationschritte in einer Bauelementetechnologie erreicht.

- Die Prozessschritte Implantation und Ausheilung sind Standardverfahren der Halbleitertechnologie, die Elemente Si bzw. Ge „halbleiterfreundlich“. Somit wird ein hoher Grad an Kompatibilität zur bestehenden CMOS-Technologie gewährleistet.

Die Beschreibung der Nanocluster-Evolution basiert auf eigenständigen theoretischen Arbeiten des Institutes, die ursprünglich für die Ionenstrahlensynthese von vergrabenen  $\text{SiO}_2$ -Schichten und  $\text{CoSi}_2$ -Leitbahnen in Si entwickelt wurden. Mit Hilfe kinetischer Gitter-Monte-Carlo-Simulationen kann die Clusterevolution in  $\text{SiO}_2$ -Schichten durch drei Phasen charakterisiert werden (Abbildung 2).

Wie bereits erwähnt, werden bei der Implantation Si- bzw. Ge-Atome in einer Konzentration eingebracht, die die Gleichgewichtslöslichkeit für das implantierte Element in der Matrix (ca.  $10^{18} \text{ At/cm}^3$ ) überschreitet und damit eine Übersättigung der  $\text{SiO}_2$ -Schicht mit den Fremdatomen entsteht. Das System ist bestrebt, diese Übersättigung abzubauen. Daher bildet sich für hinreichend große Diffusionskoeffizienten der Fremdatome (z.B. bei der Implantation in erwärmte Substrate) bereits während der Implantation, sonst zu Beginn des nachfolgenden Temperprozesses, ein Ensemble winziger Si- bzw. Ge-Ausscheidungen (Präzipitate) mit einer spezifischen Größenverteilung. Bei diesem Prozeß sinkt die Konzentration der in Überlöslichkeit befindlichen ungebundenen Fremdatome (Monomere) in der  $\text{SiO}_2$ -Schicht bis zur Löslichkeitsgrenze (Keimbildungsphase). Das eigentliche Clusterwachstum erfolgt während der thermischen Behandlung durch den Prozeß der Ostwald-Reifung. Die treibende Kraft der Ostwald-Reifung ist die Minimierung der totalen Oberflächenenergie der Cluster. So nimmt gemäß der Gibbs-Thomson-Relation die Gleichgewichtskonzentration gelöster Fremdatome um einen Cluster mit wachsendem Clusterradius stark ab, was einen Diffusionsstrom der Fremdatome von kleineren zu größeren Clustern bewirkt. Dies hat zur Folge, daß in einem Ensemble von Präzipitaten größere Cluster bevorzugt wachsen und durch die Auflösung der kleinen Cluster die Clusterdichte abnimmt. Durch den gezielten Abbruch der thermischen Behandlung können spezielle Tiefen- und/oder Größenverteilungen der Nanocluster erzeugt werden.

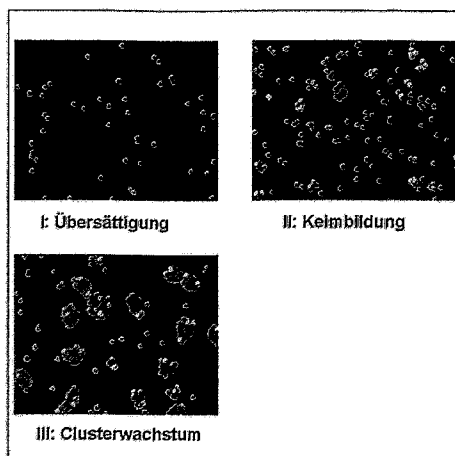


Abb. 2 Kinetische 3D-Monte-Carlo-Simulation der Nanocluster-Evolution Darstellung von drei Stadien während der Ionenstrahlensynthese von Nanoclustern. Aus einer übersättigten Lösung von Fremdatomen im  $\text{SiO}_2$  (Bild I, rote Punkte) entstehen Fremdatomausscheidungen (Bild II, grün), aus denen sich nachfolgend während des Temperprozesses Nanocluster (Bild III) entwickeln. Die resultierende Nanoclusterverteilung wird entscheidend von der Stromdichte bei der Implantation und dem Diffusionskoeffizienten der implantierten Ionen bestimmt.

### Mikrostrukturelle Eigenschaften der Halbleiter-Nanocluster

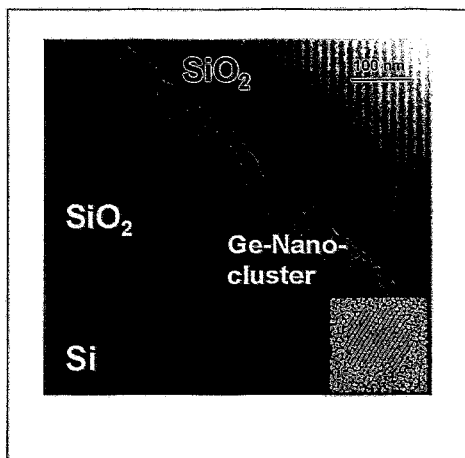
Die Entwicklung realitätsnaher Modelle der Nanocluster-Evolution, verbunden mit dem Wunsch, spezielle Nanocluster-Verteilungen definiert und reproduzierbar einstellen zu können, erforderten umfassende mikrostrukturelle Untersuchungen. Als Verfahren kamen insbesondere die Rutherford-Rückstreuung (RBS), die hochauflösende Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und die Röntgendiffraktometrie (XRD) zum Einsatz. Da der Nachweis von Si-Clustern in einer  $\text{SiO}_2$ -Schicht ein diffiziles Problem darstellt (und nur über die Netzebenenabbildung kristalliner Cluster in der amorphen Matrix mittels TEM gelingt), wurde der weitaus überwiegende Teil der Mikrostrukturuntersuchungen an Ge-implantierten  $\text{SiO}_2$ -Schichten durchgeführt. Hier gelingt auch die Abbildung nichtkristalliner Cluster im Elektronenmikroskop infolge des Massekontrastes. Es war ein glücklicher Umstand, daß sich dieser Fall infolge der besseren elektrooptischen Eigenschaften Ge-reicher  $\text{SiO}_2$ -Schichten auch als bevorzugte Anwendungsvariante erwies (siehe nächster Abschnitt).

Abbildung 3 zeigt als typisches Beispiel die Verteilung von Ge-Nanoclustern in einer 500 nm dicken  $\text{SiO}_2$ -Schicht. Die Ergebnisse der Untersuchungen hinsichtlich Struktur, Geometrie und Lage der Cluster können wie folgt zusammengefaßt werden:

- Der IBS-Prozeß ermöglicht die Erzeugung von Halbleiter-Nanoclustern in  $\text{SiO}_2$ -Schichten mit typischen Abmessungen im Bereich 2 bis 10 nm. Übereinstimmend mit der Theo-



Abb. 3  
Die Querschnitts-TEM-Aufnahme zeigt durch Ionenstrahlsynthese erzeugte kristalline Ge-Halbleitercluster in einer amorphen  $\text{SiO}_2$ -Matrix. [ $\text{Ge}^+$ , 350 keV,  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$  in 500 nm  $\text{SiO}_2$ ; Temperung:  $1100^\circ\text{C}$ ,  $\text{N}_2$ , 60 min] Typische Clusterabmessungen nach der Temperung liegen im Bereich 4-7 nm. Deutlich zu sehen ist, daß die Nanocluster in einem Clusterband angeordnet sind. Im kleinen Bild sind in einer hochauflösenden TEM-Aufnahme  $\langle 111 \rangle$ -Netzebenen eines einzelnen Nanoclusters (Größe: ca. 6 nm) zu erkennen.



rie der Ostwald-Reifung wächst die mittlere Clustergröße mit steigender Ausheiltemperatur.

- Bei niederen Ausheiltemperaturen ( $T \leq 600^\circ\text{C}$ ) sind die Cluster vorwiegend amorph, während für  $T \geq 900^\circ\text{C}$  bevorzugt kristalline Cluster beobachtet werden. Die Kristallite haben eine sphärische Geometrie und sind in der Matrix hinsichtlich ihrer Kristallorientierung willkürlich verteilt.
- Oft sind die Cluster in Bändern angeordnet. Die Lage der Clusterbänder kann durch eine gezielte Wahl der Implantations- und Temperparameter variiert werden. Abbildung 4 zeigt anhand von drei Beispielen unterschiedliche Clusterverteilungen. Die Möglichkeit der Realisierung definierter Clusterverteilungen ist hinsichtlich unterschiedlicher Anwendungen von großem Interesse.

Bei der Ausbildung der Cluster-Verteilungen spielen Oberflächen- und Grenzflächeneffekte eine erhebliche Rolle. So wird nach Temperungen oberhalb  $900^\circ\text{C}$  in einer Stickstoffatmosphäre eine erhebliche Umverteilung des implantierten Ge festgestellt. Die Analyse der Ge-Verteilung in der  $\text{SiO}_2$ -Schicht mittels RBS zeigt, wie sich aus einem gaußförmigen Implantationsprofil eine multimodale Ge-Verteilung mit zusätzlichen Peaks in der Nähe der Oberfläche und an der  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -Grenzfläche entwickelt (Abbildung 5). Die Ge-Anreicherung an der  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -Grenzschicht charakterisiert diese Grenzfläche als effektive Senke für in Lösung befindliches Ge.

Je nach ursprünglichem Implantationsprofil und Ausheiltemperatur ist dieser Ge-Anteil nahe der

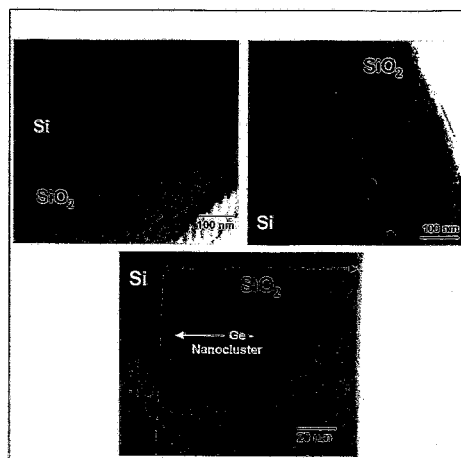


Abb. 4  
Durch eine gezielte Prozeßführung bei der Implantation und der nachfolgenden Temperung gelingt es, Nanoclusterverteilungen „maßzuschneidern“. So ist es möglich, nahezu die gesamte  $\text{SiO}_2$ -Schicht homogen mit Clustern zu füllen (linkes Bild), sehr große (polykristalline) Cluster zu erzeugen (rechtes Bild) oder ein sehr schmales Clusterband unmittelbar an der  $\text{SiO}_2/\text{Si}$ -Grenzfläche zu generieren.

inneren Grenzfläche im  $\text{SiO}_2$  lokalisiert (mitunter als schmales Clusterband) oder in die oberste Schicht des kristallinen Si-Substrates eingebaut. Die Ge-Umverteilung nahe der Oberfläche beruht auf dem Einfluß der Restfeuchte [ppm-Bereich] in der „inerten“ Temperatmosphäre, die zur Bildung von oxidisch gebundenem Ge führt. Noch stärkere Auswirkungen haben oberflächenchemische Prozesse bei ei-

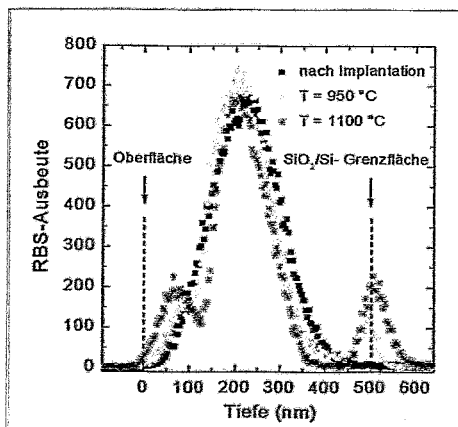


Abb. 5  
Änderung der Ge-Verteilung im  $\text{SiO}_2$  nach der thermischen Behandlung der Schichten  
Das Hauptmaximum repräsentiert den Ge-Anteil in den Clustern (vgl. Abb. 3), daneben wird eine mit der Ausheiltemperatur zunehmende Ge-Anreicherung an der  $\text{Si}/\text{SiO}_2$ -Grenzfläche und in Oberflächennähe beobachtet.  
[Implantation:  $\text{Ge}^+$ , 350 keV,  $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ , Parameter: Ausheiltemperatur]

ner wasserstoffhaltigen Ausheilatmosphäre (z.B. Ar + 7% H<sub>2</sub>). Hier wird eine sehr starke Ge-Umverteilung in der SiO<sub>2</sub>-Schicht infolge der Bildung extrem beweglicher GeH<sub>x</sub>-Verbindungen beobachtet, die bei hohen Temperaturen (1100°C) zu einer Halbierung des Ge-Gehaltes in der Schicht (Ausdiffusion) führt. Im Hinblick auf die Anwendung sind die beschriebenen Umverteilungen mitunter unerwünscht. Durch eine zusätzliche dünne Deckschicht aus Siliziumnitrid als Diffusionsbarriere bzw. die Anwendung (optischer) Kurzzeit-Temperverfahren (Zeiten ms ...s) kann die Umverteilung besonders in der Nähe der SiO<sub>2</sub>-Oberfläche deutlich reduziert werden.

### Elektrooptische Eigenschaften von nanoclusterhaltigen Schichten

Im Jahre 1993 demonstrierten erstmalig japanische Forscher daß, ähnlich wie bei porösem Si, auch Quarzglas (SiO<sub>2</sub>), in dem mittels Ionenstrahlsynthese Si-Nanocluster erzeugt wurden, bei der Photolumineszenz (PL) rotes Licht emittiert.

Bei der Übertragung des Prozesses auf dünne SiO<sub>2</sub>-Schichten war das Erstaunen umso größer, als die so erzeugten Si-nanoclusterhaltigen Schichten eine intensive blaue PL aufwiesen. Vergleichende Messungen an reinem SiO<sub>2</sub> bzw. Ar-implantierten Schichten ergaben, daß die Lumineszenz kein Effekt des SiO<sub>2</sub> an sich oder des Strahlenschadens nach der Implantation sein konnte, da hier keine oder nur eine sehr geringe PL beobachtet wird.

Die nachfolgenden Untersuchungen zeigten, daß sich die PL-Intensität und die spektrale Lage der ermittelten Strahlung hinsichtlich der implantierten Halbleiter-Ionen deutlich unterscheiden (Abbildung 6). Si-implantierte Schichten lumineszieren bei  $\lambda = 460$  nm, während das Emissionsmaximum für Ge-clusterhaltige Schichten bei etwa 400 nm liegt und gleichzeitig die PL-Intensität gegenüber einer Si-Implantation etwa eine Größenordnung höher ist. Variationen der Ausheilbedingungen (Temperatur, Zeit) führen ausschließlich zu Änderungen in der PL-Intensität, nicht jedoch zu einer Verschiebung der Lumineszenz-Wellenlänge. Daraus folgt, daß die beobachtete blaue Lumineszenz kein Quantum-Confinement-Effekt der Nanocluster sein kann, da dann mit steigender Ausheiltemperatur (und damit wach-

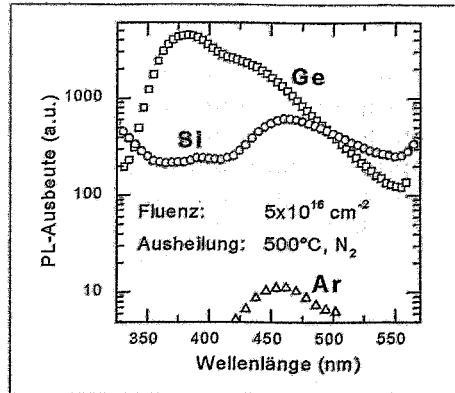


Abb.6 Einfluß der Ionenart bei der Implantation auf die Photolumineszenz-Ausbeute im blauen/violetten Wellenlängenbereich. Die Implantation erfolgte mit einer einheitlichen Fluenz von  $5 \times 10^{16}$  Ionen/cm<sup>2</sup> in 500 nm dicke SiO<sub>2</sub>-Schichten. Die signifikant höhere PL-Ausbeute von Si bzw. Ge gegenüber einem neutralen, masseähnlichen Element (Ar) schließt eine strahlenschadensbedingte Lumineszenzursache aus.

sender mittlerer Clustergröße) eine Wellenlängenverschiebung in Richtung des roten Spektralbereiches auftreten müßte. Abgesehen von sehr geringen Anteilen im Bereich des Untergrundes konnte jedoch keine rote oder infrarote ( $\lambda < 2 \mu\text{m}$ ) PL gefunden werden.

Somit stellt sich die Frage: Was verursacht eigentlich die Lumineszenz? Von Ge-dotierten optischen Gläsern ist eine blaue Lumineszenz bei 3,1 eV (= 400 nm) gut bekannt und wird dort mit einem Sauerstoff-Fehlstellenmodell zwischen zwei SiO<sub>4</sub>-Tetraedern beschrieben, bei dem ein oder beide Si-Atome durch Ge substituiert sind (O<sup>•</sup>≡ Si-Ge≡ O<sup>•</sup> bzw. O<sup>•</sup>≡ Ge-Ge≡ O<sup>•</sup>). Ein alternatives Modell führt die Lumineszenz auf zweifach koordinierte Ge-Atome (O-Ge-O) in der SiO<sub>2</sub>-Matrix zurück. Die Ähnlichkeit der Lumineszenzspektren Ge-dotierter Quarzgläser und der hier untersuchten Ge-implantierten SiO<sub>2</sub>-Schichten legt nahe, daß dieses spezielle Lumineszenzzentrum auch bei der Ionenstrahlsynthese erzeugt wird. Wenn auch hinsichtlich dessen genauer atomarer Konfiguration bis heute zumindest die beiden genannten Modelle konkurrieren, ist doch das dazugehörige Energieniveauschema unumstritten (Abbildung 7).

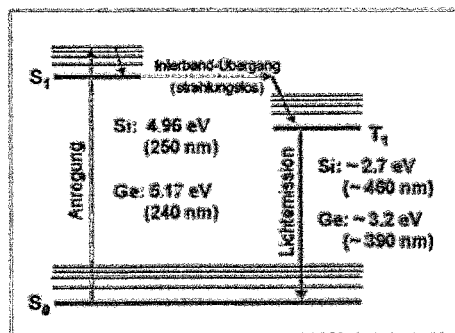


Abb. 7 Energieniveauschema der blauen (Si) bzw. violetten (Ge) Lumineszenz von Si- und Ge-reichen SiO<sub>2</sub>-Schichten

Demnach entspricht die violette bzw. blaue Lumineszenz einem unter Aussendung von Licht vollzogenen Triplett-Singlett-Übergang ( $T_1-S_0$ ) eines angeregten Elektronenzustandes, der sowohl für Si- als auch für Ge-reiche Schichten möglich ist. Noch nicht endgültig beantwortet läßt sich die Frage, welche Funktion die Ge-Cluster für die blaue Lumineszenz haben. Derzeit bestehen erste begründete Annahmen, die experimentell weiter zu verifizieren sind:

3)

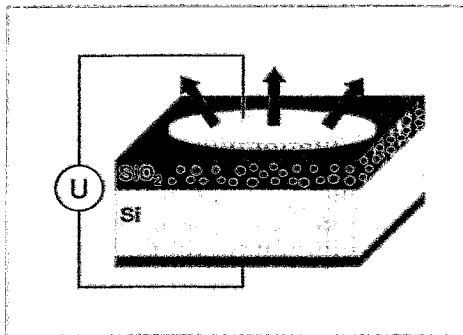
Bei der Kathoden-Lumineszenz erfolgt die Anregung der Lumineszenz durch Elektronen gewöhnlich in einem Raster-Elektronenmikroskop. Durch Aufnahme der Lumineszenzspektren als Funktion der Elektronenenergie (2...20 keV) kann eine Tiefeninformation der Lumineszenz gewonnen werden.

- Tiefenselektive Kathodo-Lumineszenz-Untersuchungen<sup>9)</sup> und die Korrelation des Oberflächen/Volumenverhältnisses der Cluster mit der PL-Ausbeute deuten darauf hin, daß sich die lumineszierende atomare Konfiguration bevorzugt an der Oberfläche der Ge-Cluster bildet.
- Von porösem Si abgeleitete Vorstellungen weisen den Clustern bei der Absorption der einfallenden Strahlung eine zentrale Bedeutung zu.

Die praktische Relevanz eines Lichtemitters wird hauptsächlich nach seinem Elektrolumineszenz-Vermögen (EL) beurteilt. Für diese Untersuchungen wurden MOS-Bauelemente präpariert. Dazu wird auf den implantierten  $SiO_2$ -Filmen eine dünne transparente Deckelektrode (Indium-Zinn-Oxid) als Dotmatrix strukturiert und das Si-Substrat rückseitig mit einem ganzflächigen Al-Kontakt versehen (Abbildung 1 und Abbildung 8).

Abb. 8

Schematische Darstellung der Si-Feststruktur zur Bestimmung der EL-Eigenschaften der nanoclusterhaltigen Schichten. Vom Grundkontakt stellt die Struktur einen MOS-Kondensator dar. Der Stromfluß durch das (implantierte)  $SiO_2$  beruht auf Tunnelprozessen bei hohen elektrischen Feldstärken.



Legt man nun zwischen Deck- und Rückelektrode eine positive Spannung an, so beobachtet man bei hinreichend hohen Feldstärken über der  $SiO_2$ -Schicht ( $> 5 \text{ MV/cm}$ ) eine stabile blaue (Si) bzw. violette (Ge) Elektrolumineszenz (Abbildung 9), deren spektrale Verteilung

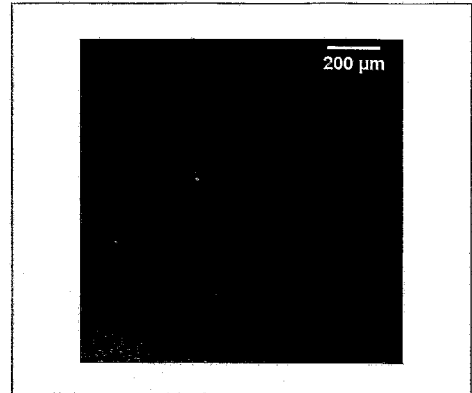


Abb. 9

Die CCD-Aufnahme zeigt die intensive Elektrolumineszenz einer Teststruktur im violetten Spektralbereich. Die Lumineszenz entsteht in einer dünnen  $SiO_2$ -Schicht, in der Ge-Nanocluster eingebettet sind. Die Lichtemission kann mit bloßem Auge deutlich wahrgenommen werden.

und insbesondere das Emissionsmaximum nahezu identisch mit den PL-Spektren ist. Die EL-Ausbeute ist über mehrere Größenordnungen proportional zum Elektronenstrom durch das Oxid, was einen Anregungsmechanismus durch energiereiche Elektronen (Energien  $> 5 \text{ eV}$ ) im Oxid nahelegt (Abbildung 10). Diese „heißen“ Elektronen sind charakteristisch für den Fowler-Nordheim-Tunnelprozeß, bei dem Elektronen aus dem Si-Substrat bei hohen Feldstärken die Potentialbarriere in das  $SiO_2$  überwinden und sich dann im Leitungsband des Isolators bewegen.

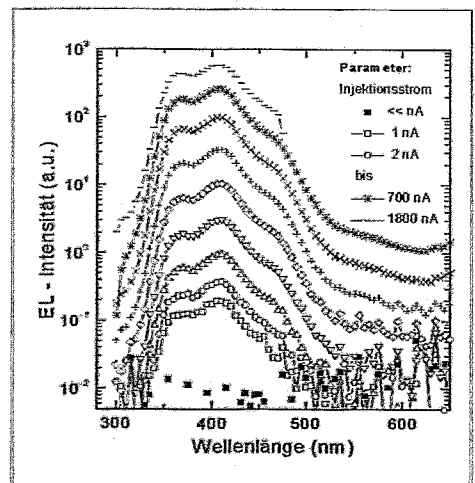


Abb. 10

EL-Spektren einer Si-Teststruktur mit Ge-implantierter  $SiO_2$ -Schicht ( $d_{ox} = 500 \text{ nm}$ ) als Funktion der Stromstärke. Die EL-Intensität ist über drei Größenordnungen streng proportional zum Injektionsstrom, die Lage der Emissionsmaxima (Wellenlänge) hingegen wird davon nicht beeinflusst.

Die externe leistungsbezogene Quanteneffizienz liegt für die Ge-reichen  $\text{SiO}_2$ -Schichten derzeit im Bereich  $0,5...1 \times 10^{-3}$ , was für Lumineszenzelemente auf der Basis von Si-Strukturen einen außerordentlich hohen Wert darstellt. Der Auskopplung des Lichtes kommt zugute, daß infolge der relativ niedrigen Unterschiede in den Brechungsindizes ( $\text{SiO}_2$ : 1,47; ITO: 2,10; Luft: 1 jeweils bei  $\lambda = 400 \text{ nm}$ ) Reflexionsanteile an den Grenzflächen gering gehalten werden können.

An dieser Stelle soll aber auch auf einige Probleme und offene Fragen der bisherigen Entwicklung hingewiesen werden. Sie liegen im wesentlichen im Anregungsmechanismus selbst begründet. Der Prozeß der Fowler-Nordheim-Tunnelung erfordert für die benötigten Elektronenströme im Bereich  $n\text{A}... \mu\text{A}$  hohe elektrische Feldstärken. Dies bedeutet einerseits relativ hohe Betriebsspannungen (typisch: 60 - 70 V je 100 nm Oxiddicke), andererseits führt die Hochfeldbelastung zu einer kontinuierlichen Schädigung des Oxides, die letztendlich zu einer irreversiblen Zerstörung des Oxides bei typischen Ladungsdichten von einigen  $\text{C}/\text{cm}^2$  mündet. Durch den Übergang zu dünnen Oxidschichten werden diese Probleme teilweise gemindert, da die absolute Betriebsspannung verringert werden kann und die Durchbruchfestigkeit thermischer  $\text{SiO}_2$ -Schichten mit abnehmender Oxiddicke zunimmt. Erste Experimente haben inzwischen gezeigt, daß die blaue Lumineszenz auch bei Oxiddicken um 100 nm realisiert werden kann. Als ein weiterer offener Punkt muß die Zeitkonstante der Lumineszenz genannt werden, die nach bisherigen Untersuchungen für Ge-implantierte  $\text{SiO}_2$ -Schichten im  $\mu\text{s}$ -Bereich liegt. Dies ist zwar im Vergleich mit alternativen Si-basierenden Lichtemittern (poröses Si, Er-dotiertes Si) ein guter Wert und für eine Reihe denkbarer Anwendungen (z. B. in der Überwachungstechnik) durchaus ausreichend, für optoelektronische Schnittstellen in hochintegrierten Schaltkreisen der Mikroelektronik sind jedoch Zeitkonstanten im ns-Bereich erforderlich.

## Ausblick

Die Entwicklung der letzten Jahre hat zu signifikanten Verbesserungen der Leistungsparameter Si-basierender Lichtemitter geführt. Wahrscheinlich wird die Art der Lichterzeugung nicht für Anzeigeelemente oder starke Lichtquellen zu nutzen sein, da die Intensität im Vergleich zu modernen Verbindungshalbleitern (z. B. GaN, GaP, GaAs) zu gering ist. Die weitere Entwicklung im Hinblick auf integrierbare optoelektronische Schnittstelle erscheint jedoch realistisch. Welche der derzeitig untersuchten Varianten im Gesamtspektrum der Möglichkeiten letztendlich für eine Anwendung praktikabel wird, ist noch nicht absehbar. Die Entscheidung wird zugunsten der Lösung ausfallen, welche die Anforderungen der Praxis hinsichtlich Intensität - Schnelligkeit - Zuverlässigkeit - CMOS-Kompatibilität am besten erfüllen kann und zudem kostengünstig herstellbar ist.

Dafür sind noch eine ganze Reihe grundlegender wissenschaftlicher Fragen zu klären, die derzeit Gegenstand eigener Forschungsaktivitäten sind. Parallel werden im FZR auch die anwendungsorientierten Arbeiten weitergeführt. So wurde 1997 ein erster Optokoppler, bestehend aus einem Nanocluster-Lumineszenzelement und einer Standard-Si-Fotodiode, aufgebaut und dessen prinzipielle Funktionsfähigkeit nachgewiesen. In diesem Jahr ist vorgesehen, in Zusammenarbeit mit der Fakultät für Elektrotechnik der FernUniversität Hagen, die erste Variante eines monolithisch integrierten, ganz in Si-Technik hergestellten Optokopplers zu realisieren.

Nanocluster haben auch interessante Eigenschaften für Anwendungen außerhalb der Optoelektronik. Auf den ladungsspeichernden Eigenschaften von Nanoclustern beruht ein neuartiges Konzept nichtflüchtiger Halbleiterspeicher, das gegenüber Flash-EEPROM's eine wesentlich höhere Anzahl von Schreib/Lesezyklen ermöglicht. Auch diese Entwicklung soll in den nächsten Jahren im Institut verfolgt werden. Aber das wäre schon wieder ein eigener Beitrag ...

# DIE ROLLE VON HUMINSÄUREN IN DER UMWELT

Karl-Heinz Heise, Susanne Pompe, Katja Schmeide, Marianne Bubner, Heino Nitsche

Institut für Radiochemie

Huminsäuren sind Biopolymere, die zu den natürlich vorkommenden Huminstoffen gehören. Sie wurden im Jahre 1786 erstmalig von dem deutschen Chemiker Karl Franz Achard (1753-1821) beschrieben, dessen Arbeiten mit den Anfängen der wissenschaftlich begründeten Landwirtschaft, insbesondere der Zuckergewinnung aus Rüben, verbunden sind.

Achard gelang es als erstem, Huminsäuren aus Torf durch alkalische Extraktion und Ausfällung mit Schwefelsäure als Substanz zu isolieren. Schon sehr bald darauf wurden die Huminsäuren als genereller und vor allem essentieller Bestandteil landwirtschaftlich nutzbarer Böden erkannt. Bis heute sind Huminsäuren ein Gegenstand wissenschaftlicher Untersuchungen geblieben, die meist mit wissenschaftlichen Fragestellungen der Bodenkunde als Teil der modernen Agrarwissenschaften im Zusammenhang stehen. Auch die Medizin befaßt sich mit Huminsäuren, vornehmlich im Bereich der Balneologie, die Huminsäuren in Moor- und Brunnenwässern, Torf sowie Erden als erwiesenen Heilfaktor ansieht.

Beide Disziplinen haben mit ihren überwiegend pragmatisch geprägten Betrachtungsweisen viele wertvolle Beiträge zur Phänomenologie der Huminsäuren geleistet. Das Wissen über Huminsäuren im Sinne einer umfassenden physikalisch-chemischen Stoffkenntnis, die nicht nur chemische Reaktionen mit anderen Stoffen widerspruchsfrei zu deuten vermag, sondern auch Voraussagen über Wechselwirkungen zuläßt, ist dabei jedoch zurückgeblieben. In jüngster Zeit werden Huminsäuren zunehmend zum Objekt der ökochemischen Forschung. Dieses ist die Konsequenz aus der Erkenntnis, daß den Huminsäuren aufgrund ihrer chemischen Reaktivität im globalen Wechselwirkungsgeschehen der Stoffe in der zunehmend anthropogen belasteten Biosphäre, besonders in Bereichen mit Bergbauhinterlassenschaften, eine bedeutende Rolle zukommt. Das Institut für Radiochemie leistet mit seinen Grundlagenuntersuchungen zur Huminsäurechemie hierfür anwendungsorientierte Beiträge.

## Huminsäuren – noch immer ein wenig bekannter Teil der Biosphäre

Die Menge an Huminsäuren auf der Erde beträgt geschätzt  $10^{12}$  Tonnen, die damit etwa 0,2% des insgesamt auf der Erde vorhandenen, hauptsächlich in Form von Carbonaten gebundenen Kohlenstoffs repräsentieren. Sie verteilen sich annähernd gleich zwischen den gelösten Huminsäuren in den Ozeanen und den Huminsäuren in den Böden der Kontinente. Die Einzelheiten der natürlichen Bildungsprozesse der Huminsäuren sind noch weitgehend ungeklärt. Sicher ist aber, daß Huminsäuren, wie alle Huminstoffe, Abbauprodukte abgestorbener Biomaterie sind. Ebenso gilt als gesichert, daß die Mechanismen der Huminsäurebildung nicht üblichen chemischen Reaktionsalgorithmen folgen, sondern stochastisch ablaufende Prozesse sind. Die Vielfalt der primären Biomaterie und der Reaktionsbedingungen, die von äußeren Faktoren wie Temperatur, Konzentration u.a. mitbestimmt werden, ermöglicht eine noch weit größere Vielfalt an Reaktionsabläufen und damit eine quasi unendliche Anzahl, wenn auch immer einander sehr ähnlicher Endprodukte. So sind nach statistischen Überlegungen in einem Kilogramm Huminsäure im Durchschnitt lediglich zwei identische Moleküle zu erwarten! Daraus folgt, daß der Stoff „Huminsäure“ gar keine eindeutig definierbare, einheitliche Substanz sein kann und daß jede physikalisch-chemische Parametrisierung einer Huminsäure stets nur den Mittelwert über die individuellen physikalisch-chemischen Parameter der vorliegenden Huminsäurespezies ergibt. So ist der in Abbildung 1 gezeigte Strukturvorschlag für eine Huminsäure, der 1993 von Schulten und Schnitzer veröffentlicht worden ist, auch nur als eine der unendlich vielen Möglichkeiten für ein Huminsäuremolekül anzusehen. Dennoch vermag dieses Abbild das Wesen der Huminsäuren anschaulich wiederzugeben: Huminsäuren sind äußerst kompliziert aufgebaute Stoffe, für die keine Strukturprinzipien erkennbar sind.

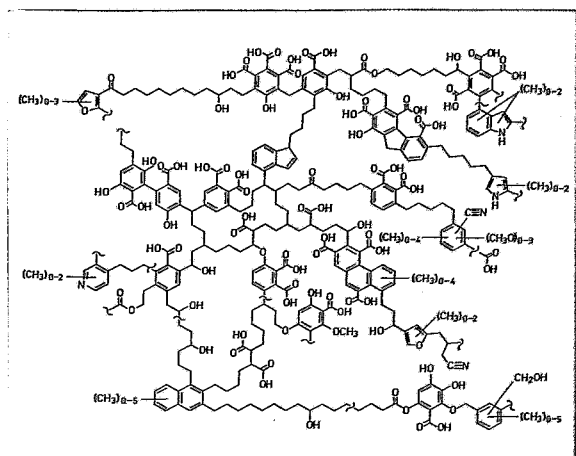


Abb. 1  
Strukturvorschlag für eine Huminsäure

### Charakterisierung von Huminsäuren

Für die chemische Reaktivität von Huminsäuren sind ihre funktionellen Gruppen maßgebend. Es sind hauptsächlich sauerstofftragende funktionelle Gruppen wie Carboxyl- und phenolische OH-Gruppen, die in der Abbildung 1 deutlich zu erkennen und durch Infrarot-Spektroskopie leicht nachweisbar sind. Abbildung 2 zeigt dafür beispielhaft das Infrarot-Spektrum der aus natürlichen Ressourcen stammenden Aldrich®-Huminsäure mit der ausgeprägten Bande bei einer Wellenzahl um 1720 cm<sup>-1</sup>, die für die Carboxylgruppen von organischen Säuren charakteristisch ist.

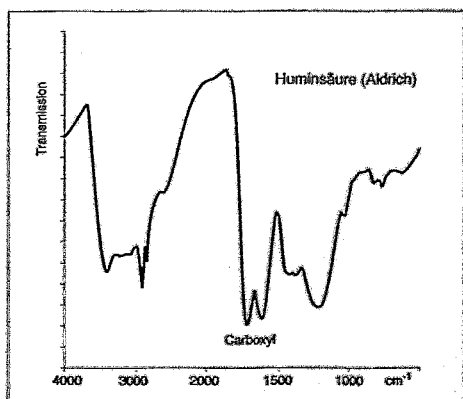


Abb. 2  
Infrarot-Spektrum einer Huminsäure (Aldrich®)

Die Quantifizierung der funktionellen Gruppen erfolgt mittels analytisch-chemischer Methoden. Üblich sind dafür Titrationsverfahren. Als

überlegene Alternative dazu hat sich die in unserem Institut entwickelte radiometrische Bestimmung funktioneller Gruppen erwiesen, weil im Gegensatz zu den oben genannten „klassischen“ Verfahren hiermit die funktionellen Gruppen unabhängig von ihrem Dissoziationsgrad bestimmt werden. Die Bestimmung erfordert nur geringe Substanzmengen und erreicht dennoch eine hohe Genauigkeit.

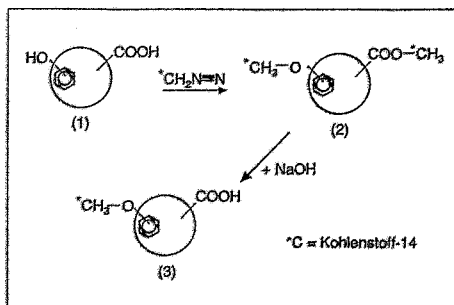


Abb. 3  
Reaktionsschema der im Institut für Radiochemie entwickelten radiometrischen Bestimmung funktioneller Gruppen in Huminsäuren mit <sup>14</sup>C-Diazomethan (<sup>14</sup>CH<sub>2</sub>N=N) (1)=Huminsäure; (2)=<sup>14</sup>C-methylierte Huminsäure; (3)=verseifte <sup>14</sup>C-methylierte Huminsäure mit intakter <sup>14</sup>C-Phenolether-Gruppe

Das Prinzip der Bestimmung ist in Abbildung 3 schematisch dargestellt: Zunächst werden alle Aziden, d. h. dissoziierbaren Wasserstoffatome der Huminsäure (1), mit [<sup>14</sup>C]Diazomethan methyliert, dessen spezifische Radioaktivität exakt bestimmt ist. Bei dieser Derivatisierungsreaktion werden die Carboxylgruppen verestert und die phenolischen OH-Gruppen verethert (2). Bei der anschließenden alkalischen Verseifung (3) werden die Ester wieder gespalten, während die Phenolether intakt bleiben. Aus der Differenz der gemessenen Radioaktivität in der methylierten Huminsäure und in der anschließend verseiften Huminsäure ergibt sich die Menge an Carboxylgruppen. Die in der verseiften Huminsäure verbliebene Radioaktivität, die äußerst empfindlich nachgewiesen werden kann, entspricht der Menge an phenolischen OH-Gruppen. Auch die ursprünglich vorhandenen Esterbindungen lassen sich mit dieser radiometrischen Methode genau bestimmen.

### Huminsäure – ein besonderer Reaktionspartner

Huminsäuren stellen im natürlichen Stoffumwandlungsprozeß der Biomaterie keine stabilen materiellen Endzustände dar. Schon sehr geringe Milieuänderungen wie Änderungen des pH-Werts oder der Ionenstärke sind imstande, strukturelevante, innermolekulare Ver-

knüpfungen im Huminsäuremolekül wie Wasserstoff- oder Esterbrücken zu lösen. Dadurch kann sich das einem Wollknäuel gleichende Makromolekül soweit entfalten, daß vordem sterisch gehinderte funktionelle Gruppen aus dem Inneren für chemische Reaktionen freigesetzt und sogar die Fragmentierung des Huminsäuremoleküls eingeleitet werden kann. Diese grundsätzliche Labilität der Huminsäuren hat zur Folge, daß die Resultate von Untersuchungen mit Huminsäuren mit großen Unsicherheiten behaftet sein können. Bei der üblichen Abtrennung von Huminsäuren aus einer natürlichen Matrix, z. B. aus Oberflächenwässern oder Böden, während der der pH-Wert über mehrere Größenordnungen verändert wird, indem sie mit starkem Alkali herausgelöst und durch Säure rein ausgefällt werden, sind chemische und strukturelle Veränderungen der ursprünglichen Huminsäuren gänzlich unvermeidbar. Bei allen Untersuchungen mit dem Ziel, das Wechselwirkungsverhalten von Huminsäuren in natürlichen Systemen zu untersuchen, muß diese Eigenschaft der Huminsäuren unbedingt berücksichtigt werden. Insbesondere trifft das für die Untersuchung der Wechselwirkung von Huminsäuren mit wassergelösten Uranverbindungen und denen der anderen Aktinidenelemente zu, mit denen sich das Institut für Radiochemie befaßt. Sie liefern notwendige Daten für ökologische Prognosen stillgelegter und gefluteter Bergwerke, Halden und Absatzbecken des früheren Uranabbaus in Sachsen und Thüringen. Denn Huminsäuren, die in derartige Systeme gelangen, können aus dem Restz das Uran und die durch den natürlichen radioaktiven Zerfall des Urans gebildeten radioaktiven Folgeprodukte durch bisher nur wenig erforschte komplexchemische Vorgänge in Lösung bringen. Umgekehrt können aber auch die gelösten, mit Radioaktivität befrachteten Huminsäuren durch nachfolgende, ebenso wenig erforschte kolloidchemische Vorgänge über sich wieder absetzende Agglomerate fixiert werden. Daher sind für die ökochemische Forschung stabile, wohldefiniert synthetisierbare Standardsubstanzen mit huminsäureähnlichen Eigenschaften eine dringende Notwendigkeit, um Resultate aus Untersuchungen mit natürlichen Huminsäuren bewerten zu können.

## Modellverbindungen für Huminsäuren

Die bisherigen chemischen Kenntnisse über Huminsäuren, die vorwiegend die Ergebnisse aus der Bodenkunde reflektieren, zeigen, daß die funktionellen Gruppen meist bestimmten organischen Verbindungen zugeordnet werden können, wie bereits in der Abbildung 1 gezeigt ist. Anhand solcher, sehr einfach aufgebauter Verbindungen wie Hydroxybenzoesäuren, aliphatische und aromatische Polycarbonsäuren und andere konnten im Institut für Radiochemie schon grundsätzliche Eigenschaften von Huminsäuren studiert werden. Am Modell der o-Hydroxybenzoesäure (Salicylsäure) wurde die Art der Anbindung von Uran(VI) an Carboxylgruppen ermittelt und die komplexe Bindung bestätigt.

Durch die Blockierung der OH-Gruppe in der o-Hydroxybenzoesäure konnten weiterhin Abschätzungen darüber erhalten werden, inwieweit die phenolische Gruppe an den Komplexbildungsreaktionen beteiligt ist.

Allerdings können diese Grundverbindungen das Reaktionsvermögen von Huminsäuren nicht umfassend wiedergeben und die Ergebnisse daher auch nicht generalisiert werden. Vor allem der streng reguläre Aufbau der niedermolekularen Verbindungen und ihre im Verhältnis zu den Huminsäuren hohe Zahl funktioneller Gruppen im Molekül sind neben Löslichkeit, physikalisch-chemischer Stabilität und vielen anderen Faktoren dafür ausschlaggebend. Deshalb war es für die Forschungsvorhaben des Instituts naheliegend, sich mit der Entwicklung von entsprechenden polymeren Modellverbindungen, synthetischen Huminsäuren, zu befassen, die wesentliche Eigenschaften von natürlichen Huminsäuren widerspiegeln.

## Maßgeschneiderte synthetische Huminsäuren

Polymere, die als synthetische Huminsäuren und damit als Modellsubstanzen für natürliche Huminsäuren in Betracht kommen, müssen mit natürlichen Huminsäuren operationell übereinstimmen. Diese Übereinstimmung ist gegeben, wenn die synthetische Huminsäure ebenso, wie die natürliche Huminsäure, in Alkali löslich, in Säuren hingegen unlöslich ist.

Dieses Verhalten ist z. B. bei synthetischen Ionenaustauschern, die ebenfalls organische Polymere mit unterschiedlichen funktionellen Gruppen darstellen, nicht gegeben.

Für die chemische Synthese von huminsäure-ähnlichen Verbindungen sind zwei grundsätzliche Wege möglich: Die oxidative Polymerisation von Polyphenolen sowie die Kondensation von  $\alpha$ -Aminosäuren und reduzierenden Zuckern.

Mit dem erstgenannten Weg wird die aus der organischen Chemie bekannte Tatsache genutzt, daß Polyphenole wie Brenzkatechin (1,2-Dihydroxyphenol) oder Pyrogallol (1,2,3-Trihydroxyphenol), durch Oxidation über chinonartige Verbindungen zu braungefärbten Polymeren führen, die huminsäuretypische Merkmale aufweisen. Diese Reaktionen laufen bereits mit dem Sauerstoff der Luft ab.

Allerdings ist die hohe Aromatizität dieser Polymere, die von den aromatischen Precursoren herrührt, für Huminsäuren aus natürlichen Ressourcen eher untypisch. Die dem zweitgenannten Weg zugrundeliegende chemische Humifizierungsreaktion beruht auf der Umsetzung von reduzierenden Zuckern mit Aminosäuren zu Melanoidinen. Diese Reaktion ist bereits 1916 durch den französischen Chemiker L.C. Maillard beschrieben worden. Das Institut für Radiochemie knüpft an diese frühen Arbeiten über Huminsäuren an. Durch die gezielte Auswahl der Ausgangsstoffe, der Zucker und der Aminosäuren, sowie der Reaktionsbedingungen wie Temperatur und Konzentration, wurden von uns die Eigenschaften der Melanoidine systematisch variiert.

So konnten wir die Aromatizität durch Phenylalanin als Aminosäure-Precursor erhöhen, während durch Glutaminsäure der Carboxylgruppengehalt soweit erhöht werden konnte, daß er dem von natürlichen Huminsäuren entspricht.

Wesentlich für den Erfolg der von uns weiterentwickelten Maillard-Reaktion war die Einführung eines Trennschrittes nach der Synthese, mit dem die operationell mit natürlichen Huminsäuren übereinstimmenden, reinen Fraktionen synthetischer Huminsäuren aus dem Synthesegemisch isoliert werden konnten. Bislang sind auf diese Weise im Institut für Radiochemie vier Grundtypen synthetischer Huminsäuren und die phenolblockierten Derivate entwickelt und in Versuchsmengen rein

dargestellt worden. Inzwischen werden einige dieser synthetischen Huminsäuren auch von unseren Partnern in EU- und BMBF-Projekten für Komplektierungsuntersuchungen mit höheren Actinidenelementen erfolgreich eingesetzt.

Anders als unsere synthetischen Huminsäuren enthalten natürliche Huminsäuren stets gebundene Schwermetalle, vorwiegend Eisen, das durch Nachreinigung nicht vollständig zu entfernen ist, wie untenstehende Tabelle 1 zeigt. Die Ursache der besonders festen Bindung eines Teils des Eisens an den natürlichen Huminsäuren ist noch unklar.

Da das an Huminsäuren gebundene Eisen eine Konkurrenz zu anderen Metallen darstellt, können beispielsweise die Ergebnisse von grundlegenden Uran-Huminsäure-Komplektierungs-Experimenten im Labor, die mit natürlichen Huminsäuren durchgeführt werden, erheblich fehlerbehaftet sein. Die Validierung der Ergebnisse solcher Experimente mit einer eisenfreien, zumindest aber eisenarmen Huminsäure ist daher Voraussetzung, um hierdurch bedingte Fehler berücksichtigen zu können. Die wahrscheinlich erstmalige Synthese praktisch eisenfreier Huminsäuren erfolgte im Institut für Radiochemie durch Umsetzung von hochgereinigten Ausgangsstoffen und ebenso hochreinen Hilfsstoffen wie beispielsweise des Wassers in einer Voll-Teflonapparatur. Durch diese technisch sehr aufwendige „High-Purity“-Chemie konnte der Eisengehalt der synthetischen Huminsäure so stark vermindert werden, daß das Schwermetall mittels ICP-MS nicht mehr nachweisbar ist.

### Markierte Huminsäuren

Isotope Markierungen von Huminsäuren erweitern die Möglichkeiten beträchtlich, deren Wechselwirkungen in der Biosphäre zu untersuchen. Mit dem stabilen Isotop Kohlenstoff 13 angereicherte Huminsäuren sind beispielsweise für NMR-Untersuchungen von Huminsäurestrukturen und -bindungen wertvoll, weil der Kohlenstoff-13-Gehalt im natürlichen Koh-

Eisen-Gehalte	natürliche HS ungereinigt	natürliche HS nachgereinigt	synthetische HS Typ M1	synthetische HS Typ M1 hochrein
in ppm	11730 $\pm$ 150	863 $\pm$ 40	< 80	nicht nachweisbar

Tab. 1  
Eisengehalte in natürlichen und synthetischen Huminsäuren



lenstoff-Isotopengemisch für viele dieser Untersuchungen nicht immer ausreichend ist. Kohlenstoff-14 ist das radioaktive Isotop des Kohlenstoffs, das sich durch natürliche Kernreaktionen in der Atmosphäre stetig bildet und die Grundlage der Radiocarbon-Methode zur Altersdatierung ist. Mit Kohlenstoff-14 markierte Huminsäuren werden vor allem für Verteilungsuntersuchungen und Stoffbilanzierungen im Labor benötigt. Allerdings sind dafür höhere C-14-Anreicherungen erforderlich, als für die Altersdatierung notwendig.

Die Möglichkeiten der Isotopenmarkierung natürlicher Huminsäuren sind begrenzt. Zwar führt die Kompostierung biologischen Materials zu Huminstoffen und damit auch zu Huminsäuren. Die Gewinnung markierter Huminsäuren hierdurch erfordert aber den Einsatz entsprechend markierter, pflanzlicher Ausgangsmaterialien. Bei ihrer Anzucht mit markierten Precursoren und der folgenden Kompostierung zu Huminstoffen ist eine Verringerung der Konzentration des Kohlenstoffisotops in der isolierbaren Huminsäure gegenüber der Ausgangskonzentration im Precursor um mehrere Größenordnungen unvermeidbar. Damit sind die Isotopenkonzentrationen jedoch zu gering.

Auch der Weg einer nachträglichen Einführung der Markierung in Huminsäuren ist kaum gangbar. Er bedingt in jedem Fall einen drastischen chemischen Angriff auf die Substanz mit der Folge von gravierenden stofflichen Veränderungen. Derartige Produkte sind für Untersuchungen meist unbrauchbar.

Die chemische Huminsäuresynthese ist hingegen auch für die Darstellung Isotopmarkierter Huminsäuren bestens geeignet. Im Institut für Radiochemie werden daher spezielle Markierungssynthesen für Huminsäuren entwickelt, um sie für Sorptionsuntersuchungen von Huminsäure an Gesteinen und Mineralen einzusetzen. Hierbei kommen die langjährigen Erfahrungen auf dem Gebiet der organischen Tracerchemie im Institut zum Tragen. Die Markierungspositionen der eingesetzten C-13- oder C-14-Precursoren werden so ausgewählt, daß die Markierung im Gerüst der Huminsäure erfolgt und nicht im Bereich der funktionellen Gruppen. Dadurch wird gewährleistet, daß die Markierung während chemischer Umsetzungen, beispielsweise bei Komplektierungsuntersuchungen, erhalten bleibt und nicht als Reaktionsfragment, etwa als Kohlendioxid, abgespalten und damit im Resultat nicht berücksichtigt wird.

## Theoria cum Praxi

Innerhalb eines derzeit im Institut für Radiochemie laufenden EU-Projekts werden die Huminstoffe des Hochmoors „Kleiner Kranichsee“ untersucht, von dem die Abbildung 4 einen Eindruck vermittelt. Die Arbeiten erfolgen einvernehmlich mit der zuständigen Umweltbehörde, dem Umweltamt in Aue/Schwarzenberg, das die erforderlichen, sehr umfangreichen Probenahmen in dem sensiblen Naturschutzgebiet ermöglicht. Dieses, inmitten des ehemaligen, westsächsischen Uranbergbaureviers bei Johanngeorgenstadt gelegene Moorgebiet ist ein brisantes, realitätsbezogenes Forschungsobjekt, da mit dem Uranabbau ein bedeutender, bis heute nachwirkender Eingriff in das Ökosystem der Region vollzogen wurde.



Abb. 4  
Hochmoor „Kleiner Kranichsee“  
(Foto: L. Baraniak, FZR)

Aufgrund des hohen Gehaltes an Biomasse und der intensiven biologischen Aktivitäten im Moor enthält das an verschiedenen Stellen überlaufende Wasser einen hohen Gehalt an organischen Stoffen, der zum größten Teil aus Huminstoffen besteht. Es sind daher Szenarien denkbar, unter denen die darin enthaltene, beträchtliche Huminsäurefracht zur Mobilisie-

zung von Uran und seinen natürlichen, radioaktiven Folgeprodukten aus den Hinterlassenschaften des Uranerzbergbaus führen kann. Denn in den Grubensystemen und Halden sind erhebliche Mengen an uranhaltigem Rest-erz zurückgeblieben, die freiliegen und möglicherweise in sich künftig einstellende Stoffkreisläufe einbezogen werden. Die Quantifizierung der Wechselwirkungen zwischen den in dieser Region anzutreffenden Huminsäuren und Radionukliden ist daher nicht nur von rein wissenschaftlichem Interesse, sondern hat praktische Bedeutung für die Sanierung der Uranbergbauregionen Sachsens und Thüringens.

Für die Untersuchungen der umweltrelevanten Eigenschaften der Huminsäuren des Hochmoors „Kleiner Kranichsee“, hauptsächlich des Komplexierungsvermögens mit Uran und seinen radioaktiven Folgeprodukten, aber auch des Einflusses der Huminsäuren auf das Sorptionsverhalten dieser Radionuklide an Phyllit, dem für diesen Raum relevanten Gestein, wurden im Verlauf mehrerer Monate über 400 Liter des Moorwassers aufgearbeitet.

Hierfür waren besonders stoffschonende Verfahren erforderlich, um die Inhaltsstoffe während des langwierigen Aufarbeitungsprozesses möglichst wenig zu verändern. Insgesamt wurden 14 Gramm Huminsäure isoliert, daneben auch 10 Gramm Fulvinsäure, ein den Huminsäuren sehr ähnlicher und bei den Untersuchungen unbedingt zu berücksichtigender weiterer Huminstoff. Unsere ersten Untersuchungsergebnisse zeigen, daß die Huminsäuren aus dem Hochmoor „Kleiner Kranichsee“ sich durch eine hohe chemische Reaktivität auszeichnen, die ein ausgeprägtes Komplexierungsvermögen für Uran und andere toxische und radiotoxische Schwermetalle, insbesondere die höheren Aktinidenelemente, erwarten läßt.

Die bis heute in ihrem Ablauf noch nicht vollständig aufgeklärte Maillard-Reaktion wird auch als eine der Möglichkeiten der Huminsäurebildung in der Natur diskutiert, da die erforderlichen Ausgangsstoffe in abgebauter Biomasse generell vorhanden sind. Für die natürliche Huminsäurebildung über die Melanoidine spricht auch der von uns beobachtete Ablauf der Reaktion bereits bei Zimmertemperatur und ebenso in sehr stark verdünnten, wässrigen Lösungen. Die Kenntnis der huminsäureartigen Melanoidine und insbesondere ihres Komplexbildungsverhaltens gegenüber

toxischen Schwermetallen ist deshalb nicht nur unter dem Aspekt ihrer Nutzung als Huminsäure-Modellschubstanzen und -Standards erforderlich, sondern auch deshalb, weil sie in allen Bereichen der Biosphäre als Reaktionspartner fortwährend gebildet und unmittelbar wirksam werden können. Die natürliche Melanoidinreaktion als eine Möglichkeit der natürlichen Huminsäurebildung kann daher auch für die stillgelegten, mit Holz ausgebauten Grubensysteme des ehemaligen sächsisch-thüringischen Uranbergbaus nicht ausgeschlossen werden. Die Folgen dieser Prozesse zu erfassen, ist eine weitere wissenschaftliche Herausforderung für das Institut für Radiochemie im Forschungszentrum Rossendorf.

### Schlußbemerkung

Die Erkundung der Umweltrisiken, die von den ehemaligen Uranbergbaubetrieben in Sachsen und Thüringen ausgehen, ist für nachhaltige Sanierungsmaßnahmen zur Wiederherstellung der ökologischen Gleichgewichte unverzichtbar. Die theoretisch begründeten Ansätze für Untersuchungen an ökologischen Modellsystemen im Labor liefern grundlegende Erkenntnisse über die in der Natur zu erwartenden stofflichen Wechselwirkungen im molekularen Bereich. Aber erst mit dem Vergleich dieser Resultate mit denen, die durch das Studium natürlicher Systeme gewonnen werden, ist es möglich, die verschiedenen Prozesse in der Umwelt zu verstehen. Das Institut für Radiochemie trägt mit seiner international anerkannten Huminsäureforschung dazu bei, die Kenntnisse über die in der Biosphäre allgegenwärtigen Huminsäuren, ihrer Bildung und ihres Wechselwirkungsverhaltens weiter zu vervollkommen.

# MESOSKOPISCHE QUANTENEFFEKTE IN ATOMKERNEN

Stefan Frauendorf

Institut für Kern- und Hadronenphysik

Die Kernstrukturphysik ist das älteste Teilgebiet der Kernphysik. Als ihre Geburtsstunde kann man die erste Beobachtung von  $\alpha$ -Teilchen durch das Ehepaar Curie beziffern, die sich 1997 zum 100. Male jährte. Den Beginn der Kernstrukturphysik im modernen Sinn muß man etwa 50 Jahre später datieren, als es möglich wurde, durch Präzisionsmessung der Energien von  $\alpha$ -( $^4\text{He}$  Atomkernen) und  $\beta$ -(Elektronen) Teilchen sowie insbesondere der  $\gamma$ -Quanten (sehr kurzwellige elektromagnetische Strahlung) die Energiezustände von Atomkernen zu messen. Die Bewegung der Protonen und Neutronen wird durch die Gesetze der Quantenmechanik beherrscht. Diese haben zur Folge, daß die Kerne nur bestimmte diskrete Energiewerte („Energieniveaus“) annehmen. Die Kernstrukturphysik befaßt sich u. a. mit der Messung dieser Werte sowie der Häufigkeit, mit der Atomkerne von einem in einen anderen Energiezustand übergehen (Übergangswahrscheinlichkeit) und gibt die theoretische Interpretation der experimentellen Ergebnisse. Sie ist Grundlagenforschung, deren Hauptziel darin besteht, Erkenntnisse über die Natur eines solchen endlichen Quantenvielteilchensystems, wie es der Atomkern darstellt, zu gewinnen. In diesem Beitrag sollen neue Erkenntnisse vorgestellt werden, die unsere Vorstellungen zur Struktur des Atomkerns erweitern. Außerdem werden einige Aspekte der Perspektive und Anwendung der Kernstrukturphysik diskutiert. Die Theorie der endlichen Quantenvielteilchensysteme wurde lange Zeit mit dem Blick auf den Atomkern entwickelt. Das Attribut „endlich“ bringt zum Ausdruck, daß man ein System betrachtet, das aus vielen Teilchen (mehr als 10) besteht, das aber mikroskopisch klein im Vergleich zu makroskopischen Körpern ist, die aus  $10^{23}$  Teilchen bestehen. Systeme dieser Dimension, die sowohl Charakteristika makroskopischer Körper als auch die typischen Quantenphänomene von Mikroobjekten (z. B. Atomen) zeigen, nennt man mesoskopisch (von mesos - in der Mitte). Seit etwa einer Dekade werden mit wachsender Intensität nichtnukleare mesoskopische Systeme untersucht: Tröpfchen oder Körnchen aus einigen  $10 - 10^4$  Atomen bezeichnet man als

Cluster. Das zweidimensionale Analogon sind die Quantenpunkte. Sie bestehen aus einer Metall- oder Halbleiterschicht vom Ausmaß  $10 - 1000$  nm, die sich auf der Oberfläche eines Isolators befindet. Eine weitere Realisierung sind Halbleiter mit Schichtstruktur, bei denen sich an der Grenzfläche zwischen den Schichten ein zweidimensionales Elektronengas bildet, das durch geeignete Elektroden in einem Bereich mesoskopischer Dimension eingefangen wird. Da die frei beweglichen Elektronen in diesen Strukturen den gleichen Gesetzen der Quantenmechanik wie die Nukleonen gehorchen, gibt es überraschend viele Gemeinsamkeiten mit Atomkernen, die eine Folge der endlichen Ausmaße des Systems sind. Methoden und Ergebnisse der Kernphysik, die sich am längsten mit endlichen Quantenvielteilchen Systemen befaßt, sind daher relevant für die nichtnuklearen mesoskopischen Systeme, wie an Beispielen gezeigt wird.

## 1. Schnell rotierende Kerne

Seit den 70er Jahren ist es möglich, großen Drehimpuls auf Kerne zu übertragen. Dies geschieht mit Hilfe eines Schwerionenbeschleunigers, der mittelschwere Atomkerne auf eine Geschwindigkeit bringt, die ausreicht, daß sie mit den Kernen des Materials (Target), auf das der Strahl trifft, verschmelzen (Fusion). Trifft ein Strahlkern nicht zentral auf einen Targetkern, dann rotiert das fusionierte System sehr schnell ( $10^{21}$  U/s), d. h. es trägt einen hohen Drehimpuls. Danach „kühlt“ es sich durch Verdampfung einiger Neutronen ab. Zuletzt gibt der kalte Kern seinen Drehimpuls durch eine Kaskade von  $\gamma$ -Quanten ab. Die Informationen zur Struktur schnell rotierender Kerne gewinnt man vor allem aus der experimentellen Untersuchung der  $\gamma$ -Kaskade. Diese „Hochspinspektroskopie“ erbrachte eine Fülle von neuen Erkenntnissen über die Struktur schnell rotierender Kerne. Es sollen hier nur die superdeformierten Kerne erwähnt werden.

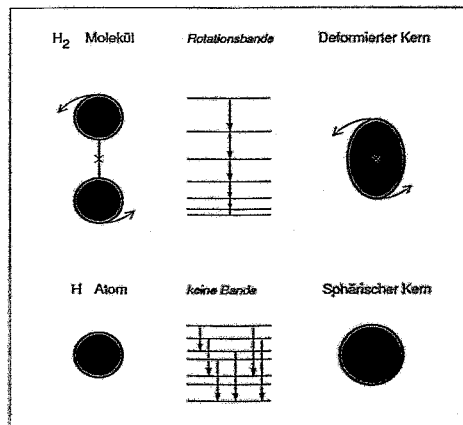
Ein Gruppe von Theoretikern aus Rossendorf und dem Vereinigten Institut für Kernforschung Dubna sagte 1976 (zeitgleich und unabhän-

gig mit einer Theoriegruppe in Schweden) vorher, daß bestimmte Kerne bei hohem Drehimpuls eine lang gezogene Form (Achsenverhältnis 1 : 2) annehmen [1]. Diese „superdeformierten“ Kerne wurden 10 Jahre später in Großbritannien experimentell nachgewiesen. Daraufhin begannen intensive experimentelle und theoretische Untersuchungen dieser extremen Kernzustände, die bis heute andauern.

## 2. Magnetische Rotation

Die Frage, wie ein System aus Teilchen, die den Gesetzen der Quantenmechanik genügen, als Ganzes rotiert, ist von fundamentalem Interesse. Eine erste Antwort gab die Molekülphysik. Diese besteht aus den zwei in Abbildung 1 illustrierten Aussagen:

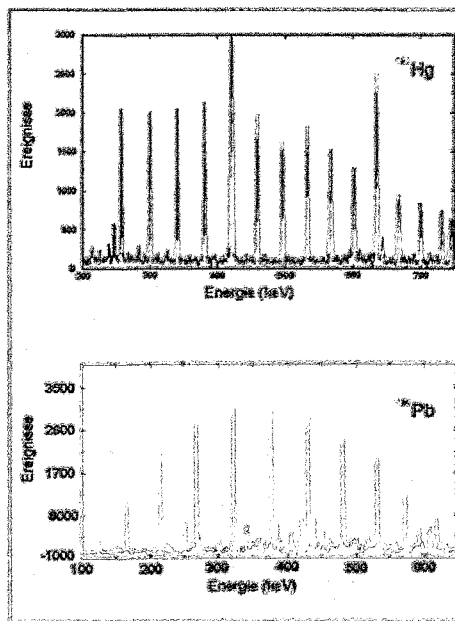
- Nur ein System mit einer genügend stark deformierten Massenverteilung kann rotieren.
- Die Rotationsbewegung ist quantisiert, d. h. nur bestimmte diskrete Werte des Drehimpulses und der Energie treten auf. Die Folge solcher Rotationszustände nennt man eine Rotationsbande.



**Abb. 1**  
Quantenrotation von Molekülen und Kernen  
Das als Beispiel gezeigte Wasserstoffmolekül  $H_2$  kann um eine Achse (Kreuz), die senkrecht zur Bindungsachse steht, rotieren, weil durch diese Anordnung der H-Atome eine Vorzugsrichtung für die Rotation definiert ist. Die Quantennatur des Moleküls kommt darin zum Ausdruck, daß der Drehimpuls nur diskrete Werte  $J\hbar$  annimmt, die ein Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums  $\hbar$  betragen (Quantisierung). Die Winkelgeschwindigkeit und die Energie sind ebenfalls diskret. Neben dem Molekül ist die regelmäßige Folge solcher Energiezustände, die man Rotationsbande nennt, dargestellt. Ein ausreichend deformierter Kern hat ebenfalls Rotationsbanden. Das Wasserstoffatom ist kugelsymmetrisch. Es spezifiziert keine Vorzugsrichtung für eine Rotation und zeigt daher keine Rotationsbanden. Aus dem gleichen Grund beobachtet man in sphaerischen Kernen unregelmäßige Abstände zwischen den Energieniveaus.

Bohr und Mottelson haben erkannt, daß dieses Konzept auch für die Atomkerne gilt und wurden dafür 1976 mit dem Nobelpreis geehrt. Wenn ein Kern eine deformierte Gestalt hat, dann ordnen sich seine Energieniveaus in Rotationsbanden. Die Messungen zeigen, daß die Rotationsbanden um so regelmäßiger sind, je größer die Deformation ist. Abbildung 2 oben zeigt als charakteristisches Beispiel eine solche Bande im superdeformierten Kern  $^{192}Hg$ . Jede Linie entspricht dem Übergang zwischen zwei benachbarten Rotationsniveaus. Die Energie nimmt linear mit dem Kerndrehimpuls  $I$  zu. Der Abstand der Linien wird durch das Trägheitsmoment der Rotationsbewegung festgelegt. Bei Kernen, die eine nahezu sphaerische Form haben, sind Abstände zwischen den Energieniveaus unregelmäßig (siehe Abbildung 1 unten). Die Deformation des Kerns wird experimentell ermittelt, indem man die Zeit mißt, in der sich Rotationsniveaus durch Aussenden eines  $\gamma$ -Quants vom elektrischen Quadrupoltyp in die energetisch niedriger liegenden abregen.<sup>1</sup>

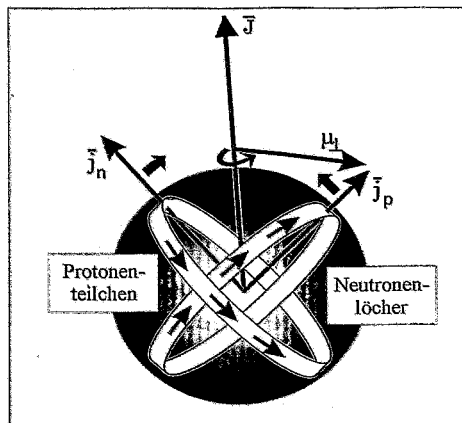
Anfang der 90er Jahre wurden in Bleikernen, bei denen bis dato nur die typischen unregelmäßigen Spektren sphaerischer Kerne beobachtet wurden, regelmäßige Rotationsbanden gefunden. Ein Spektrum wird in Abbildung 2 unten gezeigt. Es handelt sich jedoch nicht um die elektrische Quadrupolstrahlung, die bei den stark deformierten Kernen beobachtet wird, sondern um magnetische Dipolstrahlung (die in andere Richtungen als die erstere emittiert wird).



1) Der Typ gibt an, in welche Richtung das Quant emittiert wird. Die Rate, mit der ein rotierender geladener Körper elektromagnetische Wellen aussendet, nimmt mit seiner Deformation zu.

**Abb. 2**  
 $\gamma$ -Spektrum einer Rotationsbande im superdeformierten Kern  $^{192}Hg$  (oben) und einer magnetischen Rotationsbande im sphaerischen Kern  $^{208}Pb$  (unten). Jede Spektrallinie entspricht einem Übergang zwischen benachbarten Rotationszuständen. Der Energieunterschied zwischen diesen Zuständen ist gleich der Energie, bei der die Linie beobachtet wird. Der Drehimpuls nimmt bei der superdeformierten Bande um jeweils  $2\hbar$  und bei der magnetischen um  $1\hbar$  zu. Der Abstand zwischen den Linien beträgt  $4\hbar^2/2I$  bzw.  $\hbar^2/2I$ , wobei  $I$  das Trägheitsmoment der Rotationsbewegung ist. Eine gut ausgebildete Rotationsbande ist durch nahezu gleiche Linienabstände charakterisiert.

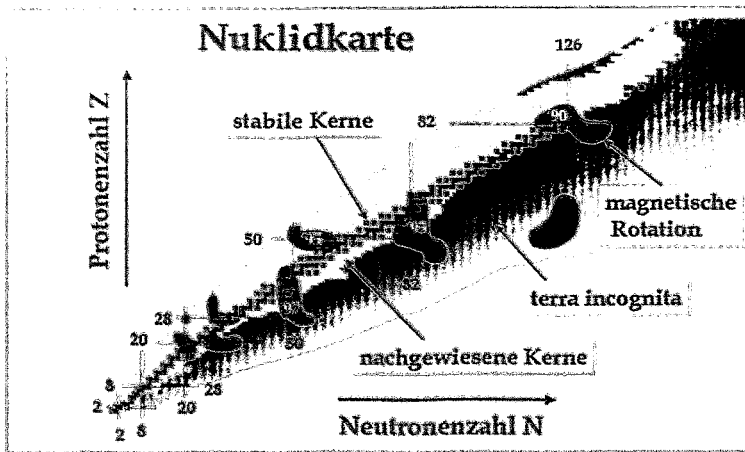
**Abb. 3**  
**Magnetische Rotation**  
 eines Atomkerns  
 Die Valenzprotonen und Valenzneutronenlöcher bewegen sich auf Kreisbahnen, wobei sie die Drehimpulse  $\vec{J}_p$  und  $\vec{J}_n$  erzeugen. Der Gesamtdrehimpuls  $\vec{J}$  nimmt dadurch zu, daß sich die beiden Ringbahnen und damit auch die Vektoren  $\vec{J}$  zueinander ausrichten.  
 Die starke magnetische Dipolstrahlung rührt daher, daß die geladenen Protonen ein magnetisches Moment ( $\mu_p$ ) erzeugen, das mitrotiert und elektromagnetische Dipolstrahlung aussendet. Dieses nimmt mit der Ausrichtung ab, wodurch die Abstrahlung schwächer wird.



Die Abwesenheit von Quadrupolübergängen im Spektrum ist ein klares Indiz dafür, daß die Deformation des Kerns sehr klein sein muß. Diese Experimente widersprechen der bewährten Vorstellung, daß regelmäßige Banden nur in genügend stark deformierten Kernen auftreten. Zu dem Zeitpunkt wurde in Rossendorf die Tilted Axis Cranking (TAC) Theorie entwickelt. Der neue Ansatz besteht darin, die Möglichkeit in Betracht zu ziehen, daß der Kern um eine Achse rotiert, die bezüglich der Hauptachsen der Dichteverteilung gekippt ist. Bisher war angenommen worden, daß die Rotationsachse mit einer der Hauptachsen der Dichteverteilung übereinstimmt, wie das bei der gleichförmigen Rotation makroskopischer Körper gemeinhin der Fall ist. Nach Ausarbeitung des entsprechenden Rechenprogramms konnten die vorher widersprüchlichen Messergebnisse in konsistenter Weise beschrieben werden. Die Interpretation der magnetischen Dipolbanden wurde 1992 auf der Konferenz in Tokio in den Grundzügen vorgestellt [2].

2)  
 Die abstoßenden Kräfte sind bestrebt, die Teilchen und Löcher auf möglichst großem Abstand zu halten

Für den neugefundenen Typ von Kernrotation hat sich die Bezeichnung „magnetische Rotation“ eingebürgert, weil nicht die deformierte Dichteverteilung, sondern lediglich ein magnetisches Dipolmoment rotiert. Wie dies möglich ist, illustriert Abbildung 3. Das wichtigste Quantenphänomen von Atomkernen ist ihre Schalenstruktur. Analog zu den Elektronen in der Atomhülle gibt es bestimmte „magische“ Protonen und Neutronenzahlen, bei denen eine Schale abgeschlossen ist. Diese Schalenabschlüsse sind in Abbildung 4 als rote Linien gezeigt. Kerne in der Nähe der Schalenabschlüsse sind besonders stabil und haben eine Kugelgestalt. Magnetische Rotation tritt in Kernen auf, die einige Protonen zusätzlich zu einer abgeschlossenen Schale haben (Valenzprotonen) und bei denen einige Neutronen in einer Schale fehlen (Valenzneutronenlöcher). Diese Protonen und Neutronenlöcher tragen einen großen Bahndrehimpuls (4 bis 6ħ). Sie bewegen sich, wie Abbildung 3 zeigt, auf kreisförmigen Bahnen. Da die Kräfte zwischen den Protonen und Neutronenlöchern abstoßend sind, ist die in Abbildung 3 gezeigte senkrechte Anordnung der beiden Bahnen energetisch am günstigsten.<sup>2)</sup> Solch ein System besitzt eine ausgeprägte Orientierung bezüglich einer Drehung um den Vektor des Gesamtdrehimpulses. Damit wird eine Rotationsbewegung möglich. Im Unterschied zu deformierten Kernen ist Orientierung nicht auf eine Asymmetrie der Dichteverteilung, sondern der Stromverteilung zurückzuführen. Dieses Resultat der Hochspinspektroskopie erweitert die aus der Molekülphysik übernommene Vorstellungen zur Quantenrotation. Das Konzept der magnetischen Rotation wurde zunächst mit Zurückhaltung aufgenommen. Die Kritik erhielt zusätzliche Nahrung dadurch, daß die gemessene Intensität der γ-Strahlung nicht, wie berechnet, mit dem Drehimpuls abnahm. Jedoch waren die Messungen in den frühen 90er Jahren noch mit großen Fehlern



**Abb. 4**  
**Die Nuklidkarte**  
 Es sind alle Kerne gezeigt, für die man ausreichende Stabilität für einen experimentellen Nachweis erwartet (grün), bzw. die bereits nachgewiesen wurden (gelb). Die obere Grenze entsteht dadurch, daß der Kern keine weiteren Protonen binden kann, die untere dadurch, daß der Kern keine weiteren Neutronen binden kann. Stabile Kerne sind schwarz eingezeichnet. Die roten Linien zeigen die magischen Zahlen (in schwarz), bei denen die Protonen oder Neutronen eine Schale abschließen. Solche Kerne sind besonders stabil und haben Kugelgestalt. In den blauen Gebieten erwartet man magnetische Rotation. Die weiße Zahl gibt das Jahr des ersten experimentellen Nachweises an.

behaftet. Erst die Entwicklung des neuen Detektorsystems GAMMASPHERE in Berkeley (USA) ermöglichte 1996 neue Messungen mit ausreichender Genauigkeit [3], deren Ergebnisse mit der Theorie übereinstimmten und die Zweifel am Konzept der magnetischen Rotation ausräumten.

Magnetische Rotation ist nicht auf das Gebiet der leichten Bleisotope beschränkt, in dem sie zuerst nachgewiesen wurde. Die Gebiete auf der Nuklidkarte, in denen man sie erwartet, sind in Abbildung 4 zusammen mit der Jahreszahl des ersten experimentellen Nachweises gezeigt. Die Kernspektroskopiegruppe des Instituts für Kern- und Hadronenphysik konnte 1997 als erste magnetische Rotation im Massengebiet um  $A = Z + N = 80$  nachweisen ( $Z = 37$ ,  $N = 45, 47$ ).

### 3. Zerstörung der Suprafluidität durch Rotation

Aus den gemessenen Abständen der Rotationsniveaus ergibt sich das Trägheitsmoment  $\Theta$  des Kerns. Die so bestimmten experimentellen Werte betragen nur etwa 30 - 40 % des sogenannten Festkörpermoments, das sich ergibt, wenn der Kern wie ein fester Körper (oder eine sehr zähe Flüssigkeit oder ein Molekül) rotieren würde. Die Reduzierung des Trägheitsmoments läßt sich dadurch erklären, daß sowohl die Protonen als auch die Neutronen (Cooper-) Paare bilden. Diese Paare befinden sich in einem sogenannten suprafluiden Zustand, d. h. sie haben keine Viskosität. Aus diesem Grund kann ein Teil der Kernmaterie nicht mitrotieren. Theoretische Rechnungen auf der Grundlage dieser Vorstellung geben die Messungen gut wieder.

Hinreichend schnelle Rotation zerstört die Paar-Korrelationen zwischen den Nukleonen. Der Kern geht vom suprafluiden in den normalen Zustand über. Die allgemein akzeptierte Ansicht besagt, daß damit das Trägheitsmoment auf den Festkörperwert ansteigen sollte. Überraschenderweise haben wir gefunden, daß in deformierten Kernen um  $A = 170$  das Trägheitsmoment nur etwa 60 % des Festkörperwertes erreicht [7]. Momentan analysieren wir alle verfügbaren  $\gamma$ -Spektren im Hochspinbereich, für den man annehmen kann, daß der Normalzustand erreicht ist. Für die meisten Kerne liegt das Trägheitsmoment signifikant unter dem Festkörperwert. Dies bedeutet, daß ein Kern im Normalzustand keineswegs, wie bisher an-

genommen, wie ein fester Körper rotiert. Vielmehr ähnelt die Bewegung der Rotation einer idealen Flüssigkeit, die Wirbel enthält. Letztere sind eine Folge davon, daß der Kern aus einer relativ kleinen Zahl von Protonen und Neutronen besteht, die sich nach den Gesetzen der Quantenmechanik bewegen.

Die Erkenntnisse zur Kernrotation sind für die magnetischen Eigenschaften von Metallclustern und Quantenpunkten interessant, weil die Bewegungen der Nukleonen im rotierenden Kern und die der Elektronen im Magnetfeld sehr ähnlich sind.

Die starken Abweichungen des Kernträgheitsmoments vom Festkörperwert äußern sich als Verstärkung der Magnetisierung der Cluster, welche die von makroskopischen Proben aus dem gleichen Material um mehrere Größenordnungen übertreffen kann [5].

Die Untersuchung der Eigenschaften supraleitender Cluster und Quantenpunkte ist hochaktuell, seit Supraleitung in mesoskopischen Systemen bis in die Dimension von etwa 100 nm experimentell nachgewiesen wurde [6]. Dabei ist eine wichtige Frage, wie ein Magnetfeld die Supraleitung zerstört. Das analoge Problem der Zerstörung der Suprafluidität der Kernmaterie durch Rotation wird im Institut für Kern- und Hadronenphysik untersucht. Durch den detaillierten Vergleich von TAC-Rechnungen mit experimentellen Rotationsspektren konnten wir für Kerne um  $A = 170$  das Übergangsgebiet im Spinbereich von 10 bis 30  $\hbar$  lokalisieren [7, 8]. Zugleich untersuchen wir den Übergang vom supraleitenden in den normalen Zustand in nichtnuklearen mesoskopischen Systemen mit Hilfe von kerntheoretischen Methoden [9]. Sowohl für Kerne als auch für Cluster und Quantenpunkte findet man eine Verwischung des Phasenübergangs sowie starke Unterschiede zwischen Systemen mit gerader und ungerader Teilchenzahl, die charakteristisch für Systeme mit einer kleinen Teilchenzahl sind.

Cluster und Quantenpunkte werden intensiv untersucht, weil solche mesoskopischen Systeme neue Anwendungsmöglichkeiten eröffnen. Es ist z. B. möglich, die Elektronen in einem Quantenpunkt zu zählen. Computerbauteile auf der Grundlage von Einelektronenschaltelernen werden bereits diskutiert. Die Effektivität von Solarzellen könnte erheblich verbessert werden, indem man sie aus in ein Trägermaterial eingebetteten Halbleiterclustern herstellt. Siliziumcluster sind im Unterschied zu makroskopischen Siliziumkörpern Photo- und Elektroluminatoren. Man hofft, mittels dieses Effekts

optische mit elektronischen Bauelementen zu koppeln. Das Institut für Ionenstrahlphysik und Werkstofforschung im Forschungszentrum Rossendorf bearbeitet diese vielversprechende Richtung, auf die der Beitrag von v. Borany et. al. in diesem Jahresbericht genauer eingeht. Die Untersuchung mesoskopischer Systeme läßt die Kern- und Festkörperphysik wieder enger aneinander rücken. Dem wird bereits durch theoretische Arbeiten Rechnung getragen [5, 9]. Der geplante Freie-Elektronen-Laser an dem im Aufbau befindlichen ELBE-Elektronenbeschleuniger wird auch experimentelle Möglichkeiten in dieser Richtung eröffnen.

#### 4. Quo vadis, Kernstrukturphysik?

Die Kernstrukturphysik befaßt sich mit den diskreten Energiezuständen der Kerne. Diese kann man nur beobachten, wenn die Temperatur des Kerns in der Nähe des Nullpunktes liegt. Durch diese Beschränkung ist das neu zu erkundende Territorium durch zwei Möglichkeiten abgesteckt: Zum einen kann man, wie oben dargestellt, den Kern in schnelle Rotation versetzen. Zum anderen kann man die Zahl der Protonen und Neutronen im Kern stark verändern.

Der Fortschritt der experimentellen Hochspinspektroskopie bestand in den letzten beiden Dekaden vor allem in der Entwicklung geeigneter Detektorsysteme, die ermöglichen, besonders interessante schwache  $\gamma$ -Linien aus den komplexen Spektren zu filtern. Abbildung 5 zeigt das EUROBALL-Detektorsystem in Legnaro (Italien), an dessen Entwicklung das Institut für Kern- und Hadronenphysik maßgeblich mitgewirkt hat. Eine besonders große Empfindlichkeit erreicht man dadurch, daß man viele Einzelzähler möglichst lückenlos um das Target, in dem die  $\gamma$ -Strahlen erzeugt werden, anordnet. Die derzeit empfindlichsten Spektrometer sind GAMMASPHERE in den USA und der EUROBALL. Beide Geräte bestehen aus über 100 Einzeldetektoren. Mit dem GRETA-Projekt wird in den USA ein noch weitergehendes Detektorkonzept entwickelt, bei dem in der Endphase einige Tausend Einzeldetektoren das Target in mehreren Schichten umgeben.

Abbildung 4 zeigt, wie bereits erwähnt, die Nuklidkarte. Weite Gebiete sind Terra Incognita. Die Erforschung der Struktur der Kerne in diesem Gebiet wird das Hauptarbeitsgebiet der Kernstrukturphysik in den nächsten Jahren sein. Diese Kerne werden in den für Experi-

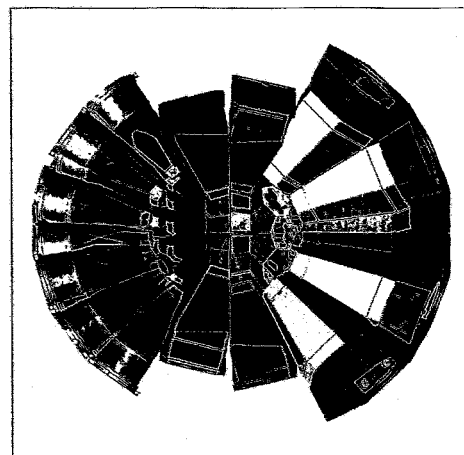


Abb. 5  
Das EUROBALL-Detektorsystem

Unterschiedliche  $\gamma$ -Detektoren werden so um das Target angeordnet, daß keines der emittierten  $\gamma$ -Quanten (durch gelbe Linien angedeutet) entweichen kann. Das Spektrometer ist in der Darstellung geöffnet und nur eine Hälfte gezeigt. Die vom Institut für Kern- und Hadronenphysik mit entwickelten Clusterdetektoren sind auf der rechten Seite (violett). Diese bestehen ihrerseits aus jeweils sieben Einzeldetektoren. Insgesamt enthält der EUROBALL 231 Einzeldetektoren, die von verschiedenen europäischen Teilnehmerländern beigesteuert wurden.

mente üblichen Kernreaktionen in nur verschwindend kleinen Mengen produziert. Hinzu kommt, daß sie sehr instabil sind, weil sie durch Aussenden von Neutronen, Protonen und  $\alpha$ -Teilchen schnell wieder zerfallen. Dieses Hindernis soll durch sogenannte „radioaktive Strahlen“ überwunden werden. Diese werden erzeugt, indem man durch experimentell gut handhabbare Kernreaktionen leicht instabile Kerne, die entweder besonders neutronen- oder protonenreich sind, produziert. Diese werden in einen weiteren Beschleuniger injiziert und als Teilchenstrahl für Experimente an den stark instabilen Nukliden zur Verfügung gestellt. Das Institut für Kern- und Hadronenphysik wird sich mit den für den EUROBALL entwickelten Detektoren an solchen Experimenten beteiligen, die am REX-Isolde Beschleuniger im europäischen Forschungszentrum CERN bei Genf durchgeführt werden.

Die physikalischen Fragestellungen zu den Kernen in den unbekanntenen Regionen der Nuklidkarte sind sehr weit gespannt. Hier sollen nur drei Beispiele herausgegriffen werden. Auf der protonenreichen Seite sind Kerne mit gleicher Protonen- und Neutronenzahl ( $N=Z$ ) interessant, insbesondere diejenigen mit der größten erreichbaren Masse  $A=N+Z$ . In diesen Kernen treten Paarkorrelationen zwischen Neutronen und Protonen auf (Abbildung 6), an deren

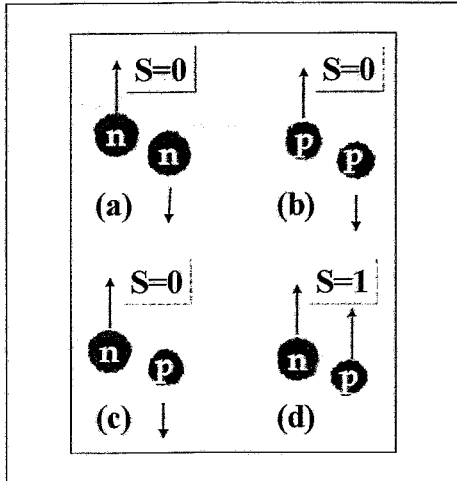


Abb. 6  
 Verschiedene Möglichkeiten von Paarkorrelationen in Kernen  
 Der Nucleonenspin ist durch einen Pfeil gekennzeichnet. Der Gesamtspin des Paares ist mit  $S$  bezeichnet. Sein Bahndrehimpuls ist 0. Paarung mit  $S=0$ , die den Cooper Paaren von Elektronen in einem Supraleiter entspricht, ist zwischen gleichen (a, b) und ungleichen (c) Nucleonen möglich, Paarung mit  $S=1$  (d) nur zwischen ungleichen (Pauliprinzip). Eine ungeklärte Frage ist, ob die Proton - Neutronpaare zum Spin 0 oder 1 koppeln. Die Fälle (c) und (d) sind nicht nur für die Kernphysik neu, denn die Paarkorrelationen in Supraleitern und  $^3\text{He}$  betreffen nur gleiche Teilchen.

Untersuchung das Institut für Kern- und Hadronenphysik beteiligt ist.

Auf der neutronenreichen Seite erwartet man, daß die Überschußneutronen das Kerninnere wie eine dicke Haut umgeben. Diese Neutronenhaut soll besonders starke Paarkorrelationen haben und sehr niederenergetische Schwingungen gegen das Kerninnere ausführen.

Abbildung 7 zeigt die Reste einer Supernova. Detaillierte Kenntnis der Struktur der instabilen Kerne ist äußerst wichtig, um die astrophysikalischen Prozesse in Supernovae und anderen gigantischen Explosionen im Universum zu verstehen, bei denen die schweren Elemente ( $A > 20$ ) erzeugt werden. Dabei entstehen so hohe Temperaturen, daß Ketten von thermonuklearen Reaktionen durchlaufen werden, die im Bereich der extrem protonen- und neutronenreichen Kerne an den Rändern der Nuklidkarte (Abbildung 4) liegen. Es ist klar, daß man die einzelnen Reaktionen gut kennen muß, um ein verlässliches Modell für den Gesamtprozeß konstruieren zu können.

Die Kernstrukturforschung hat in den letzten Jahren unerwartete Eigenschaften des Atomkerns entdeckt. Die Erkenntnisse aus dem Mikrokosmos der Atomkerne sind wesentliche Bausteine in unserem Bild vom Makrokosmos, das sich durch den Fortschritt in der Raumfahrttechnik rasant verändert. Die Ergebnisse der Kernstrukturforschung sind relevant für die sich rasch entwickelnde Physik der Cluster und Quantenpunkte. Andererseits führen Ergebnisse der nichtnuklearen mesoskopischen Physik zu neuen Sichten auf Resultate der Kernphysik.

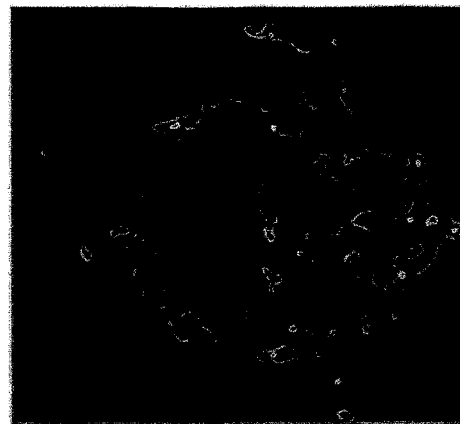


Abb. 7  
 Reste der Supernova „Cass A“  
 Sie sind bei der 1890  
 beobachteten Explosion eines  
 Sterns entstanden.

Literatur:

[1] K. Neergard, V.V. Pashkevich, S. Frauendorf, Nuclear Physics A262 (1976) 61  
 [2] S. Frauendorf, Nuclear Physics A 557 (1993) 259c  
 [3] R. M. Clark, S. Frauendorf et al., Physical Review Letters 78 (1997) 1868  
 [4] S. Frauendorf, Zeitschrift für Physik A 358 (1997) 163  
 [5] S. Frauendorf, V.M.Kolomietz, A.G. Magner and A.I.Sanzhur, Phys. Rev. B, in Druck  
 [6] C.T.Black, D.C.Ralf and M.Tinkham, Phys.Rev.Lett. 76 (1996) 688  
 [7] S. Frauendorf, J. Sheikh, P. M. Walker, Physical Review Letters, eingereicht  
 [8] J. B. Oliveira et al., Physical Review C 50 (1994) 1360  
 [9] N.K. Kuzmenko, V.M. Mikhajlov, S. Frauendorf, Journal of Cluster Science, eingereicht.



# DYN3D -

## EIN DREIDIMENSIONALES COMPUTERMODELL FÜR DIE ANALYSE HYPOTHETISCHER STÖRFALLABLÄUFE IN KERNREAKTOREN

Ulrich Grundmann, Ulrich Rohde, Siegfried Mittag, Dirk Lucas, Sören Kliem

Institut für Sicherheitsforschung

### Einordnung und Zielstellung

Die Gewinnung von elektrischem Strom aus Kernenergie stellt in den meisten Industrieländern eine mittelfristig unverzichtbare Energiequelle dar. In Deutschland wurden z. B. 1997 35% der Elektroenergie aus Kernenergie gewonnen, in Frankreich waren es 78%. Die Entwicklung der Kernenergie ist in der Zukunft auf eine weitere Erhöhung der Sicherheit gerichtet, damit auch bei den unwahrscheinlichsten Störfallszenarien keinerlei Radioaktivität in die Umgebung gelangt. Der EPR (European Pressurized Water Reactor), der eine gemeinsame deutsch-französische Weiterentwicklung der gegenwärtigen Druckwasserreaktoren darstellt, wird diese Forderungen erfüllen. Für den Nachweis, daß in einem Kernkraftwerk während eines angenommenen Störfalles keine sicherheitsrelevanten Parameter überschritten werden, spielt die Computersimulation eine wichtige Rolle.

Zu den Störfällen zählen auch die sogenannten Reaktivitätstransienten, bei denen eine positive Störung des Neutronengleichgewichtes eine erhöhte Energiefreisetzung und damit eine Erhöhung der Temperaturen im Reaktor bewirkt. Der hypothetische Auswurf eines Steuerstabes bewirkt solch eine Erhöhung der Leistung, die infolge der negativen Rückkopplungseffekte der Temperaturerhöhung wieder reduziert wird. Dieses negative Rückkopplungsverhalten wird bei allen Druck- und Siedewasserreaktoren westlicher Bauart als auch bei russischen Reaktoren vom Typ WWER durch die Kernausslegung gesichert. Im Verlauf eines solchen Störfallszenariums treten jedoch bedeutende zeitliche Änderungen der räumlichen Verteilung der Leistungsdichte und des Temperaturfeldes auf. Für den Nachweis der Reaktorsicherheit bei Reaktivitätsstörungen ist daher die detaillierte dreidimensionale Berechnung der instationären Prozesse im Reaktorkern mit Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen Neutronenfluß

und Temperatur- und Dichtefeldern des Kühlmittels erforderlich. Im FZR wurde für diese Zwecke das Computerprogramm DYN3D entwickelt, überprüft und für Analysen hypothetischer Störfallszenarien eingesetzt. DYN3D beinhaltet Modelle für die dreidimensionale Berechnung der stationären und zeitabhängigen räumlichen Neutronenflußverteilung, die Simulation der Kühlmittelströmung im Reaktorkern und die Ermittlung der maximalen thermischen und mechanischen Brennstabbelastung. Der Code ist sowohl für Druck- und Siedewasserreaktoren westlicher Bauart (DWR und SWR) als auch für russische WWER-Reaktoren anwendbar, welche sich u. a. durch die hexagonale Geometrie der Brennelemente von westlichen Konzepten unterscheiden.

Durch Beteiligung an internationalen Vergleichsrechnungen, Analysen zu Experimenten an Forschungsreaktoren sowie die Nachrechnung von Meßdaten aus Kernkraftwerken wurde eine umfassende Überprüfung der physikalischen Modelle und ihrer mathematischen Umsetzung im Computerprogramm DYN3D erreicht. Auf diese sogenannte Validierung entfällt ein bedeutender Anteil der Forschungs- und Entwicklungsarbeit, da eine unmittelbare Überprüfung von Modellen für Störfallablaufanalysen in der Praxis nicht möglich ist.

Um Prozesse besser beschreiben zu können, deren Dynamik sich aus dem Verhalten der gesamten Reaktoranlage ergibt, wie z. B. Störungen in der Wärmeabfuhr durch einzelne Dampferzeuger, wurde DYN3D im Rahmen eines Forschungsprojekts des BMBF mit dem Anlagenmodell ATHLET der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit (GRS) gekoppelt. ATHLET ermöglicht die Simulation des Verhaltens der Reaktoranlage einschließlich Kühlmittelschleifen, Dampferzeuger und Turbinen (Abbildung 1). Mit Hilfe des gekoppelten Programmsystems wurde z. B. ein Szenarium mit Bruch einer Frischdampfleitung an einer WWER-Anlage analysiert. Die Analyse

derartig komplexer Prozeßabläufe mit Hilfe gekoppelter dreidimensionaler Reaktorkern- und Anlagenmodelle stellt internationalen Höchststand dar.

### Physikalische Grundlagen des Modells

Das Reaktorkernmodell DYN3D umfaßt folgende Hauptbestandteile:

- dreidimensionale Neutronenkinetik,
- Thermohydraulik und Brennstabmodell,
- Bibliotheken neutronenphysikalischer Wirkungsquerschnitte.

Die Neutronenkinetik basiert auf der Lösung der instationären Neutronendiffusionsgleichung. Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte in diesen Gleichungen sind von der Nuklidzusammensetzung des Materials, also Anreicherung, Abbrand und Neutronengiften aus den Spaltproduktketten (z. B. Xenon) abhängig, die sich während einer Kurzzeittransiente kaum ändern, aber auch von Parametern wie Brennstofftemperatur, Moderatortemperatur und Moderatorichte, die von der Leistungsfreisetzung abhängen. Daraus ergibt sich eine Rückkopplung der Thermohydraulik auf die Neutronenkinetik. Diese Rückkopplung wird in DYN3D über Abhängigkeiten der Wirkungsquerschnitte von den Betriebsparametern beschrieben (siehe Abbildung 2).

Die Anwendung endlicher Differenzenverfahren zur numerischen Lösung der Neutronendiffusionsgleichung erfordert einen Gitterpunkt-Abstand in der Größenordnung der Diffusionslänge der Neutronen, die für die thermische Energiegruppe 1 - 2 cm beträgt. Dies würde eine sehr große Anzahl von Gitterpunkten für den Reaktorkern und damit einen gewaltigen Rechenaufwand bedingen. In den letzten Jahren wurden deshalb sogenannte nodale Entwicklungsmethoden ausgearbeitet, wobei die Diffusionsgleichung in Elementarvolumina (sogenannten Nodes) mit Hilfe verschiedener analytischer Ansätze (Entwicklung nach Elementarfunktionen) gelöst wird. Diese Teillösungen werden durch Übergangsbedingungen miteinander gekoppelt. Als Nodes betrachtet man im allgemeinen axiale Abschnitte der Brennelemente, die entweder hexagonale (WWER-Reaktoren) oder quadratische Querschnitte (DWR und SWR westlicher Bauart) besitzen und in die der Reaktorkern für die 3D-Berechnung

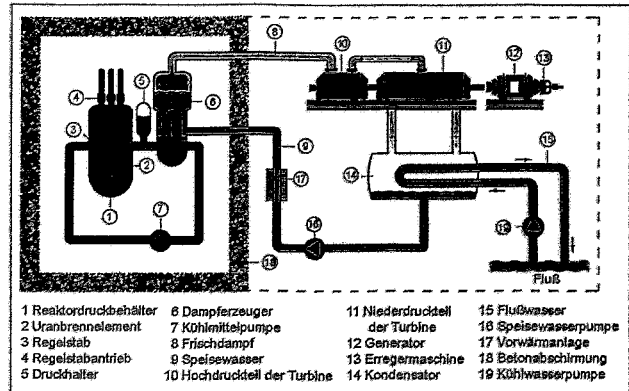


Abb. 1  
Schema eines Kernkraftwerks mit Druckwasserreaktor<sup>9</sup>

<sup>9</sup>M. Volkmer: „Basiswissen zur Thema Kernenergie“, Informationskreis Kernenergie 1984

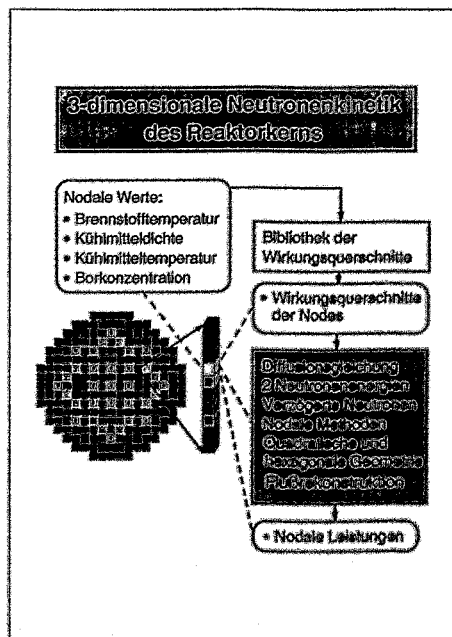


Abb. 2  
Neutronenkinetikmodell in DYN3D

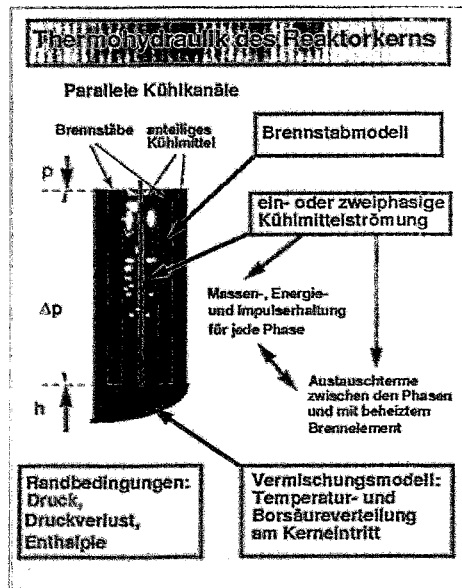
unterteilt wird. Für DYN3D wurde zunächst ein Verfahren für hexagonale Geometrie entwickelt und in den letzten Jahren durch eine Methode für rechteckige Geometrie ergänzt. Damit kann DYN3D sowohl für WWER-Reaktoren als auch für DWR und SWR westlicher Bauart angewandt werden.

DYN3D erlaubt sowohl die Berechnung stationärer Reaktorzustände als auch instationärer Prozesse mit räumlich-zeitlicher Änderung des Neutronenfeldes. Mit Hilfe stationärer Berechnungen ist auch die Verfolgung der Abbrandgeschichte eines Reaktors, von einem Anfangszustand ausgehend, sogar über mehrere Beladungszyklen möglich. Somit kann nach Vorga-

be der Betriebsgeschichte (Zeitverlauf der Reaktorleistung und der Regelstabbewegungen) der Ausgangszustand des Reaktorkerns zu jedem Zeitpunkt ermittelt werden, an dem ein hypothetischer Störfall berechnet werden soll.

Für die Berechnung der oben genannten Rückkopplungsparameter, aber auch sicherheitsrelevanter Grenzwerte wie maximale Brennstoff- und Hüllrohrtemperaturen und höchstzulässige Wärmestromdichten wird ein Thermohydraulikmodell des Reaktorkerns benötigt. In DYN3D wird der Reaktorkern thermohydraulisch als eine Anordnung paralleler Kühlkanäle beschrieben, die aus einem Brennstab mit Wärmefreisetzung und der anteiligen Kühlmittelströmung bestehen und jeweils ein Brennelement repräsentieren. Für jeden Kühlkanal werden die Energie-, Impuls- und Massenbilanzgleichungen für das strömende Kühlmittel gelöst, wobei eine ein- oder zweiphasige Strömung (Wasser und Dampf) modelliert werden kann. Die Bilanzgleichungen werden durch sogenannte Konstitutivgesetze geschlossen, welche den Massen-, Energie- und Impulsaustausch zwischen den Phasen sowie mit der beheizten Hülloberfläche beschreiben.

Abb. 3  
Thermohydraulikmodell für  
den Reaktorkern



Eine zweiphasige Kühlmittelströmung ist im Siedewasserreaktor bereits im Normalbetrieb vorhanden, aber auch in Druckwasserreaktoren können bei Störfällen erhebliche Dampfanteile infolge Kühlmittelsiedens auftreten. Das

beeinflusst wesentlich die Moderatordichte, welche sehr empfindlich in die neutronenphysikalische Rückkopplung eingeht. Ein weiterer sicherheitsrelevanter Effekt ist die sogenannte Siedekrise. Wird bei einer bestimmten kritischen Wärmestromdichte die Verdampfung so intensiv, daß sich ein geschlossener Dampffilm auf den Brennstäben herausbildet, verschlechtern sich die Wärmeübergangsbedingungen schlagartig, was zu einem drastischen Anstieg der Hüllrohrtemperaturen führt. Für Störfälle muß nachgewiesen werden, daß bei Eintreten der Siedekrise die Hüllrohrtemperatur bestimmte Grenzwerte nicht überschreitet.

Von entscheidender Bedeutung für die Modellierung von Reaktivitätsstörfällen ist auch das Brennstabverhalten. Eine Erhöhung der Brennstofftemperatur bewirkt über die Dopplerverbreiterung der Neutronenabsorptionsresonanzen eine starke negative Rückkopplung. Zum anderen dürfen bestimmte Grenzwerte wie die Schmelztemperatur des Brennstoffs oder die Oxidationstemperatur der Hülle nicht überschritten werden. Bedeutenden Einfluß auf das Wärmeübertragungsverhalten des Brennstabes hat der Gasspalt zwischen Brennstoff und Hülle. Der Wärmeübergang im Gasspalt wird durch Wärmeleitung im Gas, Strahlung und Kontakt beim Schließen des Gasspalts beeinflusst. Gaszusammensetzung sowie Spaltweite ändern sich während des Reaktorbetriebes und in Transienten durch Freisetzung gasförmiger Spaltprodukte sowie infolge thermischer, elastischer und plastischer Deformationen von Brennstofftablets und Hüllrohr. Darüber hinaus setzt bei Temperaturen etwa oberhalb 900 °C eine exotherme Metall-Wasser-Reaktion ein, die zur Oxidation des Hüllrohrmaterials (Zirkonium) und Wasserstoffbildung führt. Alle diskutierten Effekte werden in DYN3D berücksichtigt. Das Brennstabmodell in DYN3D ist damit bedeutend detaillierter als in den meisten bekannten Reaktordynamikmodellen.

Weiterhin wurde in den Code ein Modell für die Kühlmittelvermischung im Ringraum und unteren Plenum des Reaktors, also auf dem Weg von den Eintrittstutzen der Kühlschleifen in den Reaktor Druckbehälter bis zum Kerneintritt, implementiert. Dieses Vermischungsmodell stellt eine Koppelstelle zwischen Anlagenmodell und Kernmodell dar. Es erlaubt die Berücksichtigung der Auswirkungen von

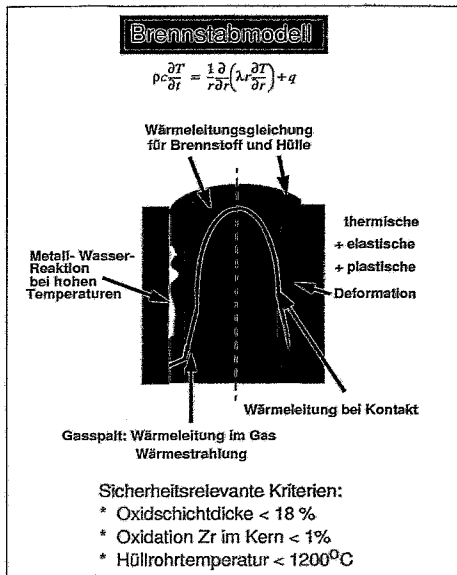


Abb. 4  
Brennstabmodell in DYN3D

Kühlmitteltemperatur- oder Borsäurestörungen in einzelnen Schleifen auf den Reaktorkern. Das Vermischungsmodell basiert auf einer analytischen Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen in der Potentialnäherung in dreidimensionaler Zylindergeometrie. Es kann davon ausgegangen werden, daß diese Näherung eine gute Beschreibung der Strömungsverhältnisse in Reaktoren des Typs WWER-440 ermöglicht. Untersuchungen für deutsche DWR vom Typ Konvoi haben dagegen gezeigt, daß sich im Ringraum dieser Reaktoren großräumige Wirbel herausbilden, die eine Anwendung der Potentialtheorie nicht erlauben. Weitergehende experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Kühlmittelvermischung in DWR werden im FZR derzeit im Rahmen eines BMBF-Vorhabens durchgeführt.

#### Validierung von DYN3D

Zur Überprüfung der thermohydraulischen und neutronenkinetischen Teilmodelle sowie des Reaktorkernmodells DYN3D als Ganzes wurde parallel zur Codeentwicklung und verstärkt in den letzten Jahren eine breite Palette von Arbeiten durchgeführt. Man unterscheidet dabei zwischen der sogenannten Verifikation, welche die Überprüfung der Plausibilität der physikalischen Modelle und Korrektheit der mathematischen Lösungsverfahren z. B. durch Codevergleiche beinhaltet, und der

Validierung anhand des Vergleichs mit experimentellen Daten. Die Verifikation und Validierung von DYN3D erfolgte anhand:

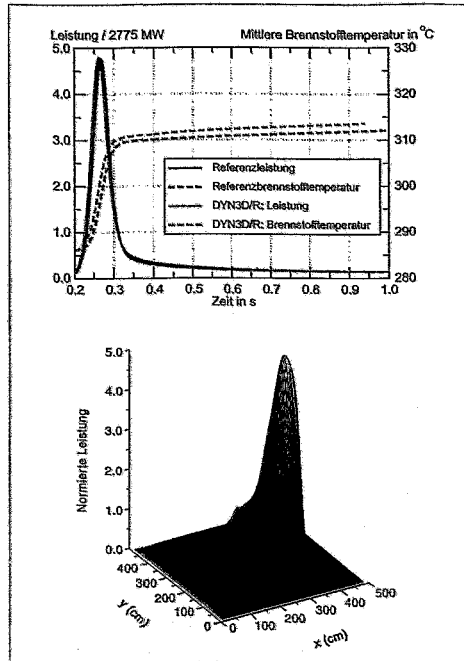
- von Vergleichsrechnungen mit ähnlichen Codes oder sogenannten Benchmarkaufgaben, für die genauere, mit Hilfe detaillierterer Teilmodelle erzeugte Lösungen existieren,
- der Nachrechnung von Experimenten zur Neutronenkinetik an einem Nulleistungsreaktor,
- der Überprüfung von thermohydraulischen Teilmodellen an Einzeleffektexperimenten aus der Literatur,
- dem Vergleich von Rechnungen zu stationären Reaktorzuständen und globalen Reaktorparametern mit Meßdaten aus KKW,
- der Nachrechnung von Betriebstransienten und betriebsnahen Störfällen in KKW.

Zu internationalen Codevergleichen für reaktordynamische Testaufgaben soll im folgenden nur ein Beispiel dargestellt werden. Unter der Schirmherrschaft der OECD wurden Benchmarkrechnungen für Steuerstabauswürfe in einem Druckwasserreaktor westlicher Bauart organisiert. Der Reaktor besitzt eine thermische Leistung von 2775 MW. Im betrachteten Fall befindet sich der Reaktor zu Beginn der Transiente im Zustand heißer Nulleistung.

Die Auswurfzeit des Stabes, verursacht durch ein angenommenes Leck im Standrohr der Steuerstabantriebe, beträgt 0,1 s. Bei der Rechnung wird ein Versagen der Schnellabschaltung angenommen. Abbildung 5 zeigt den Vergleich der Zeitverläufe von Reaktorleistung und mittlerer Brennstofftemperatur zwischen DYN3D-Rechnung und der Referenzlösung, die durch Gitterverfeinerung erzeugt wurde. Durch den Stabauswurf wird der Reaktor zunächst überkritisch, was zu einem schnellen Anstieg der Leistung führt. Die daraus resultierende Erwärmung des Brennstoffs bewirkt infolge der inhärenten negativen Dopplerrückkopplung eine Begrenzung der Leistungsexkursion, so daß keine Grenzwerte überschritten werden. In Abbildung 5 ist auch die vom ausgeworfenen Steuerstab im Moment des Leistungsmaximums verursachte Deformation der Leistungsverteilung, die eine dreidimensionale Modellierung derartiger Vorgänge erfordert, ersichtlich.

Besonders interessant für die Validierung der Neutronenkinetik war die Nachrechnung von kinetischen Experimenten am Nulleistungssystem LR-0 in Rez, wobei ortsabhängige Ei-

Abb. 5  
 OECD-Benchmark zur  
 Reaktordynamik  
 Vergleich der Brennstoff-  
 temperatur und Reaktor-  
 leistung nach DYN3D mit der  
 Referenzlösung nach Auswurf  
 eines Absorberelements  
 (oben).  
 Die Darstellung der Leistungs-  
 verteilung als Querschnitt  
 durch den Reaktorkern im  
 Moment des Leistungs-  
 maximums zeigt eine starke  
 lokale Überhöhung, die eine  
 dreidimensionale Modellierung  
 derartiger Vorgänge erfordert.  
 (unten).



fekte aufgrund der Verschiebung dezentral angeordneter Regelelemente relevant waren. Der Reaktor besteht aus verkürzten Brennelementen eines WWER-1000. In den Experimenten wurden Steuerstäbe in einzelnen Brennelementen bewegt und der zeitliche Verlauf des Neutronenflusses an verschiedenen Positionen im Reaktor gemessen. Abbildung 6 zeigt als Beispiel die relativen Detektorraten von Messung und Rechnung an drei verschiedenen Detektorpositionen für ein Experiment, wobei ein Steuerstab bewegt wurde. Während des Einfahrens des Stabes aus dem kritischen Zustand des Reaktors kommt es zu einer Absenkung des Neutronenflusses, da der Reaktor unterkritisch wird. Das darauffolgende Zurückfahren des Stabes führt wieder zur Erhöhung des Neutronenflusses, der sich dann asymptotisch einem niedrigeren Niveau im Vergleich zum Ausgangszustand annähert. Die Experimente zeigen, daß schon Bewegungen der Steuerstäbe über geringe Distanzen zu deutlichen dreidimensionalen Effekten in der Neutronenflußverteilung führen.

Für die Validierung des Thermohydraulik- und Brennstabmodells war die Nachrechnung von Experimenten zum Brennstabverhalten bei großen Leistungsexkursionen von besonderer Bedeutung. Durch Zusammenarbeit mit dem Kurchatov-Institut Moskau konnten die Ergebnisse einiger Versuchsserien zugänglich ge-

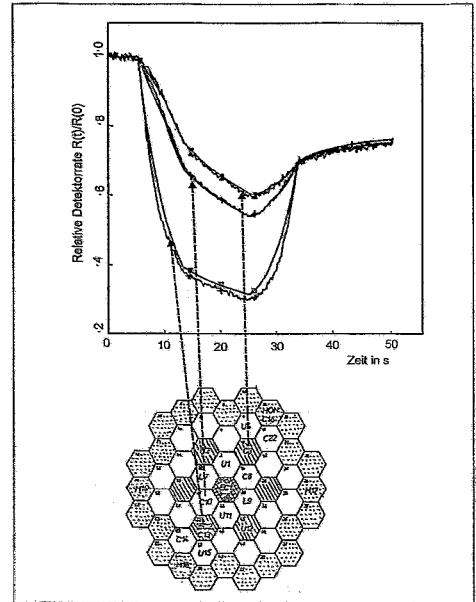


Abb. 6  
 Zeitverlauf der Neutronenflußdichte im Experimentalreaktor LR-0: Vergleich von DYN3D-Ergebnissen mit Meßwerten der Neutronenflußdichte an drei verschiedenen Detektorpositionen im Reaktorkern während der Bewegung eines Steuerstabes.

macht werden, die an einem Impulsreaktor in Semipalatinsk durchgeführt wurden. Dabei wurden verkürzte Proben von WWER-Brennstäben in luft- bzw. wassergefüllten Kapseln in den Reaktor eingesetzt, während Leistungsimpulse erzeugt wurden, wie sie bei schweren reaktivitätsinduzierten Störfällen auftreten. Der gemessene Verlauf der Hüllrohrtemperatur wurde mit den Rechenergebnissen von DYN3D verglichen.

Zur Validierung von DYN3D für stationäre Reaktorberechnungen wurden Rechenergebnisse zur Leistungsverteilung im Reaktorkern, der kritischen Brennstoffkonzentration, von Reaktivitätskoeffizienten und Reaktivitätsgewichten von Regelstäben mit den Meßdaten zahlreicher Inbetriebnahmeexperimente an KKW mit WWER (Greifswald, Dukovany, Paks, Saporoshje) verglichen, wobei die DYN3D-Rechnungen zum großen Teil durch externe DYN3D-Nutzer in den entsprechenden WWER-Betreiberländern durchgeführt worden sind. Abbildung 7 zeigt den Vergleich von Rechnungen verschiedener Codes zur Bestimmung des differentiellen Reaktivitätsgewichts beim Verschieben einer Regelgruppe im KKW Paks (Ungarn) im Vergleich mit Messungen. Die Messungen fanden am Beginn des 7. Brennstoffzyklus statt, während der Reaktorzustand für das Ende des

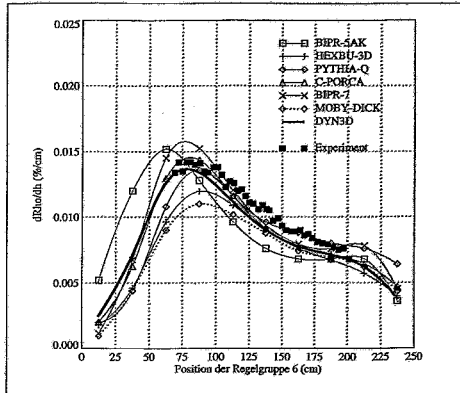


Abb. 7  
Differenzielle Wirksamkeit einer Regelgruppe  
Vergleich der Ergebnisse verschiedener Codes mit Meß-  
werten

dritten Zyklus gegeben war, so daß zunächst drei Brennstoffzyklen einschließlich der Umladungen zu berechnen waren.

Mit der Aufbereitung von Meßdaten aus Betriebs transienten und betriebsnahen Störungen in KKW wie Ausfall einzelner Hauptkühlmittelpumpen oder Lastabwurf auf Eigenbedarf aufgrund der Trennung des Generators vom Netz und ihrer Nachrechnung mit DYN3D-ATHLET wurde begonnen. Der Vergleich der Rechenergebnisse mit Meßdaten ermöglicht die schrittweise Validierung des Programmkomplexes im Zusammenspiel aller Komponenten. Aus der Analyse eventueller Abweichungen zwischen Messung und Rechnung werden notwendige Modellverbesserungen abgeleitet. Derzeit beteiligen wir uns an der Lösung eines Benchmarkproblems zu einem Frischdampflecksszenarium für einen DWR amerikanischer Bauart mit gekoppelten neutronenkinetisch-thermo-hydraulischen Systemcodes unter der Schirmherrschaft der OECD, das zur Validierung der DYN3D-Version für quadratische Brennelementgeometrie, gekoppelt mit ATHLET, beitragen wird. Somit ist insgesamt ein beachtlicher Stand der Codevalidierung für DYN3D erreicht, welcher eine Anwendung für Störfallanalysen zuläßt.

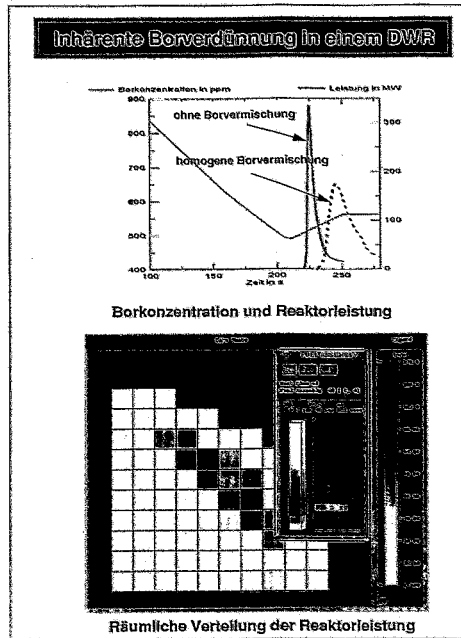
#### Anwendung für Störfallanalysen

Mit Hilfe von DYN3D und dem gekoppelten Codesystem DYN3D-ATHLET wurde eine ganze Reihe von hypothetischen Störfallszenarien wie das Auswerfen einzelner Absorberelemente nach unterstelltem Bruch der Halterung, Fehlfahren von Regelelementgruppen oder Ausfall

von Hauptkühlmittelpumpen analysiert. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen gegenwärtig Borverdünnungsstörfälle, bei welchen auf ganz unterschiedliche Weise ein Pfropfen Kühlwasser mit verminderter Borkonzentration in den Kern gelangen kann. Borsäure ist dem Kühlmittel als Neutronenabsorber zur Regelung der Neutronenbilanz während des Abbrandes der Brennelemente beigefügt. Ist die Konzentration des Bors vermindert, kann es zu einem erheblichen Reaktivitätseintrag kommen. Die Mechanismen von Borstörungen können dabei ganz unterschiedlich sein. In einem hypothetischen Borverdünnungsszenarium für einen deutschen DWR wurde unterstellt, daß ein Pfropfen deborierter Wassers durch Wiederanlaufen des Naturumlaufs in der Phase der Langzeitnotkühlung nach einem Leckstörfall in den Kern gelangt. Der Reaktivitätseintrag kann dabei so groß sein, daß der abgeschaltete Reaktor wieder kritisch wird. Ein deborierter Pfropfen kann sich bilden, wenn der Kühlkreislauf über längere Zeit unterbrochen ist und entstehender Dampf am Dampferzeuger als Wärmesenke kondensiert. Da Borsäure im Dampf schlecht löslich ist, ist das Kondensat nahezu deboriert. Abbildung 8 zeigt den Verlauf der Borkonzentration am Kerneintritt und die zeitliche Entwicklung der Reaktorleistung bei homogener Vermischung und ohne Vermischung der Borsäure sowie die räumliche Verteilung der Reaktorleistung über einen Kernausschnitt. Obwohl kurzzeitig ein beträchtlicher Leistungsanstieg des Reaktors zu verzeichnen ist und wegen des geringen Kühlmittelmassenstroms lokal Sieden auftritt, werden kritische Parameter nicht erreicht.

Mit Hilfe von DYN3D-ATHLET wurde ein hypothetisches Szenarium bei Bruch einer Frischdampfleitung an einer WWER-Anlage analysiert. Der ungünstigste Ausgangszustand für ein solches Szenarium ist der Reaktorzustand bei heißer Nulllast am Ende eines Abbrandzyklus. In diesem Zustand hat eine Temperaturabsenkung die größten Auswirkungen auf eine Reaktivitätserhöhung des Reaktors. Tritt nun der Bruch der Frischdampfleitung an einem Dampferzeuger vor der Schnellschlußarmatur auf, so kühlt die betroffene Kühlschleife rasch aus, und die Temperatur im kalten Strang nimmt stark ab. Das Auskühlen der übrigen Kühlschleifen über den gemeinsamen Frischdampfkollektor wird durch das Schließen der Schnellschlußarmaturen verhindert. Als konservative Annahme wird bei Auslösung der Reaktorschneid-

Abb. 8  
 Inhärente Borverdünnung  
 in einem DWR  
 Borverdünnungsstörung bei  
 Naturumlauf im Notkühl-  
 betrieb  
 zeitliche Entwicklung (oben)  
 und räumliche Verteilung der  
 Reaktorleistung (unten)



schaltung das Hängenbleiben des effektivsten Absorberelements unterstellt. Die Auskühlung einer Schleife bewirkt eine stark asymmetrische Absenkung der Kühlmitteltemperatur am Kerneintritt. Abbildung 9 zeigt die mit Hilfe des Kühlmittelvermischungsmodells berechnete Kerneintrittstemperaturverteilung. Im analysierten Fall ist der Reaktivitätseffekt der Kühlmitteltemperaturabsenkung im Reaktorkern so groß, daß die negative Reaktivitätszufuhr durch die Schnellabschaltung überkompensiert wird und es zu einem Anstieg der Leistung im abgeschalteten Reaktor kommt. Diese wird jedoch durch die Rückkopplung über die Erhöhung der Brennstofftemperatur zuverlässig abgefangen, ohne daß ein kritisches Leistungs- oder Temperaturniveau auch nur annähernd erreicht wird (siehe Abbildung 9). Die Leistungsverteilung im Reaktorkern ist dabei stark asymmetrisch mit einem Maximum in dem Teil des Kerns, in den die unterkühlte Schleife mündet. Wird bei den Rechnungen eine homogene Vermischung des Kühlmittels vor dem Eintritt in den Kern unterstellt, gibt es in den Rechnungen keine Rekritikalität des Reaktors. Umgekehrt, wird die häufig getroffene konservative Annahme gemacht, daß sich das Kühlmittel aus den einzelnen Schleifen überhaupt nicht vermischt, wird eine bedeutend höhere Leistungsexkursion berechnet. Eine realistische Einschätzung des Störfallszenariums ist also nur mit Hilfe eines gekoppelten Codesystems wie DYN3D-ATHLET möglich.

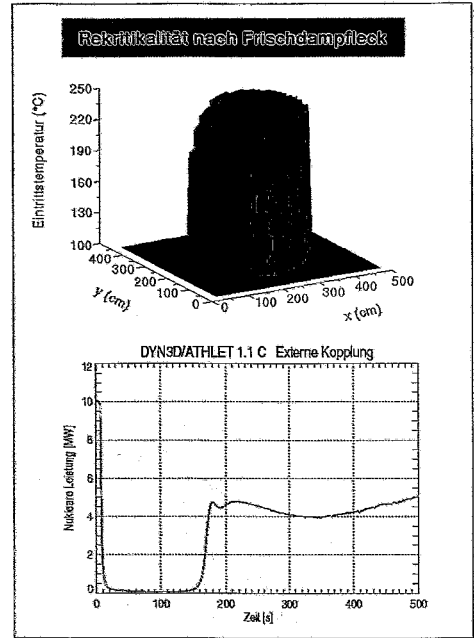


Abb. 9  
 Rekritikalität nach Frischdampfleck  
 Verteilung der Kühlmitteltemperatur im Querschnitt am  
 Kerneintritt nach einem Frischdampfleck (oben).  
 Diese asymmetrische Temperaturverteilung führt im gezei-  
 gten Fall zu einer Rekritikalität im zeitlichen Verlauf der Reak-  
 torleistung (unten).

### Internationale Kooperation

Im Jahr 1993 wurde DYN3D auf Empfehlung und mit Unterstützung der Internationalen Atomenergieorganisation in Wien einer Reihe von Forschungseinrichtungen in Bulgarien, der Slowakei, Tschechien und der Ukraine zur Verfügung gestellt, da insbesondere für WWER-Reaktoren bisher kaum dreidimensionale Modelle verfügbar waren. Seither wird das Programm in zunehmendem Maße für die Verbesserung und Vertiefung der Sicherheitsanalysen im Auftrag der Atomaufsichtsbehörden dieser Länder genutzt. Im Rahmen von Projekten des Bundesministeriums für Umwelt und Reaktorsicherheit werden slowakische und ukrainische Experten bei der Anwendung von DYN3D für verbesserte Sicherheitsanalysen unterstützt. Seitens des Instituts für Physik und Energietechnik in Obninsk bei Moskau besteht Interesse an DYN3D für Sicherheitsanalysen zu neuen Reaktorkonzepten mit verbesserten Sicherheitseigenschaften. Auch mit der Technischen Universität Budapest gibt es eine Vereinbarung zur Nutzung von DYN3D und die Entwicklung eines grafischen interaktiven Preprozessors.

Innerhalb der internationalen Assoziation „Atomic Energy Reserach“ zur Physik und Sicherheit von WWER-Reaktoren gibt es eine gute Zusammenarbeit mit Forschungs- und Ingenieurorganisationen in Finnland, Ungarn, Tschechien und Rußland zur Weiterentwicklung und Validierung reaktordynamischer Codes mit 3D-Neutronenkinetik.

Im Rahmen von Projekten des BMBF sind Forschungseinrichtungen in Bulgarien und der Ukraine an dieser Validierung durch Nachrechnung von normalen Betriebsprozessen in Kernkraftwerken wie Lastabwurf der Turbine oder Abfahren einzelner Kühlmittelpumpen beteiligt. Gastwissenschaftler, insbesondere aus Tschechien, wurden auch in die Weiterentwicklung von DYN3D einbezogen, z. B. in die Implementierung einer Methode zur lokalen Feinauflösung der Leistungsverteilung, um mögliche Heißstellen im Reaktorkern genauer zu analysieren.

Unter Federführung des FZR wird derzeit an einem durch die EU geförderten Forschungsprojekt zur Validierung solcher gekoppelten Computermodelle mit Beteiligung der GRS, finnischer und britischer Wissenschaftler unter Einbeziehung von Experten aus osteuropäischen WWER-Betreiberländern gearbeitet. Im Rahmen eines Forschungsprogrammes der EU zu fortgeschrittenen Siedewasserreaktor-konzepten wurde mit der Nachrechnung von Experimenten zur Untersuchung thermohydraulisch-neutronenkinetischer Instabilitäten am holländischen Siedewasserreaktor in Dodewaard begonnen.

## Zusammenfassung und Ausblick

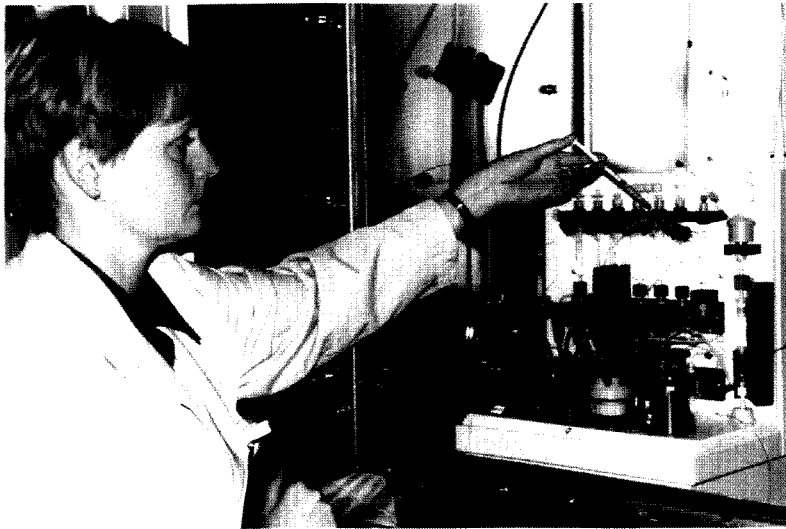
Der Computercode DYN3D stellt ein umfassend validiertes Werkzeug für die Analyse hypothetischer Störfallabläufe in Druckwasserreaktoren sowohl der russischen Baureihe WWER als auch westlicher Bauart dar. Mit der Validierung und Anwendung für Siedewasserreaktoren wurde begonnen. Gekoppelt mit dem thermohydraulischen Anlagenmodell ATHLET der GRS erlaubt DYN3D die Analyse von Transienten sowohl mit stark ausgeprägten räumlich-zeitlichen Änderungen der Leistungsdichteverteilung im Reaktorkern als auch Störungen im Reaktorkühlsystem wie Ausfall von Hauptkühlmittelpumpen oder Lecks im Frischdampfsystem. Ausgehend von den Störfallablaufanalysen können Sicherheitsreserven der Reaktorsysteme realistisch eingeschätzt, aber auch sicherheitsverbessernde Maßnahmen abgeleitet werden.

Über Forschungsvorhaben des BMBF, Projekte zu DYN3D sowie Industrieaufträge von deutschen KKW-Betreibern konnten vom FZR seit 1992 zusätzliche Drittmittel in Höhe von insgesamt ca. 2,4 Millionen DM eingeworben werden, welche eine wesentliche Verbesserung der Ausstattung mit Computertechnik und die Schaffung projektbezogener Arbeitsplätze für bis zu 5 Wissenschaftler ermöglichten.

Die Validierung von DYN3D wird, weitestgehend im Rahmen von internationalen Kooperationsbeziehungen, durch Programmvergleiche, Nachrechnung von Einzeleffektexperimenten und von Betriebsmeßdaten aus KKW ständig vervollkommenet. Die Aktualität des Codes kann nur durch eine ständige Weiterentwicklung gewährleistet werden. In nächster Zeit sind Arbeiten zur weiteren Verbesserung der Genauigkeit der nodalen Entwicklungsmethode und der Rekonstruktion der detaillierten Leistungsverteilung innerhalb der Brennelemente vorgesehen. Perspektivische Schwerpunkte sind die Entwicklung eines vollständig dreidimensionalen Thermohydraulikmodells und transporttheoretischer Ansätze für die Neutronenflußberechnung.



Abb. S. 51  
Im Radiopharmazeutischen Labor des PET-Zentrums



DAS FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF  
DATEN UND FAKTEN 1997

---

# ORGANIGRAMM

## Mitgliederversammlung

## Kuratorium

Vors.: MiniDirig Dr. F. Schmidt  
Stellv.: MiniDirig Dr. H. Eschelbacher

## Wissenschaftl. Beirat

Wiss.-Techn. Rat  
Prof. H. Nitsche

## Vorstand

Wissenschaftlicher Direktor  
Kaufmännischer Direktor  
Prof. F. Pobell  
G. Parniewski

## Vorstandsreferat

G. Zwicker

## Interne Betriebsorg.

Dr. H. Curian

## Betriebsrat

S. Dienel

## Wissenschaftlicher Geschäftsbereich

Wiss. Direktor  
Prof. F. Pobell

## Kaufmännisch-Technischer Geschäftsbereich

Kaufm. Direktor  
G. Parniewski

## Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung

Prof. W. Möller

## Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik

Dr. F. Gabriel

## Abteilung Personal- u. Sozialwesen

M. Schramm

## Hauptabteilung Technische Infrastruktur

G. Höhnel

## Institut für Bioorganische und Radiopharm. Chemie

Prof. B. Johannsen

## Zentralabteilung Neue Beschleuniger

Dr. H. Guratzsch

## Abteilung Finanz- u. Rechnungswesen

Dr. F.-D. Vogel

## Abteilung Investitionen, Techn. Dienste

G. Höhnel

## Institut für Kern- und Hadronenphysik

Prof. E. Grosse

## Zentralabteilung Analytik

Dr. K. Krogner

## Abteilung Recht, Patente und Liegenschaften

Dr. D. Gramenz

## Abteilung Ordnung und Sicherung

F. Wollmann

## Institut für Sicherheitsforschung

Prof. F.-P. Weiß

## Projektgruppe ELBE-Quelle

Dr. F. Gabriel

## Abteilung Einkauf und Materialwirtschaft

R. Offermann

## Abteilung Kommunikation und Datenverarbeitung

Dr. R. Fülle

## Institut für Radiochemie

Prof. H. Nitsche

## Projektgruppe ESFR-Beam-Line

Dr. W. Matz

## Abteilung Allgemeine Dienste

M. Klügel

## Abteilung Bibliothek

Dr. H. Grünberg

## Projektträgerschaften Energie und Umwelt

Dr. R. Maletti

# ORGANE UND GREMIEN

---

Das Forschungszentrum Rossendorf e.V. (FZR) wurde am 6. 12. 1991 als gemeinnütziger Verein gegründet. Es wird als Einrichtung der „Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz“ vom Bundesminister für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (Bund) und dem Staatsminister für Wissenschaft und Kunst des Freistaates Sachsen (Land) im Verhältnis 50 : 50 gefördert.

## Mitgliederversammlung

Die Mitgliederversammlung besteht aus juristischen und natürlichen Personen. Sie hat die nach Vereinsrecht üblichen Kompetenzen. Beschlüsse über Satzungsänderungen oder Auflösung des Vereins bedürfen der Zustimmung des Landes.

## Kuratorium

Das Kuratorium ist das umfassende Aufsichtsorgan. Es entscheidet in den grundsätzlichen Angelegenheiten des Vereins und bestimmt die Richtlinien seiner Aufgabenstellung. Das Kuratorium überwacht die Einhaltung der satzungsgemäßen Aufgaben und kontrolliert insoweit die Tätigkeit des Vorstands. Dem Kuratorium gehören 3 Vertreter des Landes, 3 Vertreter des Bundes und ein von der Mitgliederversammlung gewähltes Mitglied des Vereins an. Den Vorsitz führt ein Vertreter des Landes, stellvertretender Vorsitzender ist ein Vertreter des Bundes. Der Vorstand des Vereins und der Vorsitzende des Wissenschaftlichen Beirats nehmen mit beratender Stimme und der Vorsitzende des Wissenschaftlich-Technischen Rates als weiterer Gast an den Sitzungen des Kuratoriums teil.

Das Kuratorium besteht aus folgenden Mitgliedern:

MinDirig Dr. Frank Schmidt (Vorsitzender)	Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
MinDirig Dr. Hans Eschelbacher (Stellv. Vorsitzender)	Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie
MinR Lothar Schulte	Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie
N.N.	Bundesministerium der Finanzen
MinR Dr. Ronald Werner	Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
ROR Stefan Rix	Sächsisches Staatsministerium der Finanzen
Dr. Gert Bernhard	Forschungszentrum Rossendorf e.V.

## Vorstand

Der Vorstand des FZR setzt sich wie folgt zusammen:

Prof. Dr. Frank Pobell	Wissenschaftlicher Direktor (Sprecher des Vereins) Koordinierung, langfristige Aufgabenplanung, Erfolgskontrolle, Außenbeziehungen, Institute, wissenschaftlich-technische Organisationseinheiten
Gerd Parniewski	Kaufmännischer Direktor Kaufmännische Angelegenheiten, Rechts-, Personal- und Sozialwesen, Controlling, technische Verwaltung/Infrastruktur, Liegenschaften

## Wissenschaftlicher Beirat

Der Wissenschaftliche Beirat berät das Kuratorium und den Vorstand in allen wissenschaftlichen, technischen und organisatorischen Fragen von Gewicht. Er erarbeitet Vorschläge und Empfehlungen zu den vom Forschungszentrum zu bearbeitenden Forschungsfeldern und zu dessen Arbeitsplanung. Er bewertet periodisch Forschungsleistungen und Arbeitspläne.

Dem Beirat gehören folgende Mitglieder an:

Prof. Gerhard Kreysa (Vorsitzender)	DECHEMA Frankfurt
Prof. Bernd Stritzker (stellv. Vorsitzender)	Universität Augsburg
Prof. Günter Keßler	Forschungszentrum Karlsruhe GmbH
Prof. Axel Kleemann	Asta Medica AG Frankfurt
Prof. Wolfgang Kröger	PSI Villigen
Prof. Achim Mehlhorn	Technische Universität Dresden
Prof. Vadim Ivanovich Nefedov	Institut für Allgemeine und Anorganische Chemie, Moskau
Prof. August Schubiger	PSI Villigen
Prof. Dirk Schwalm	Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg
Prof. Hans Warlimont	Institut für Festkörper- und Werkstofforschung, Dresden

## Wissenschaftlicher Beirat des PET-Zentrums Rossendorf

Im Oktober 1997 wurde der Wissenschaftliche Beirat des PET-Zentrums Rossendorf gegründet. Er berät die Kooperationspartner FZR und TU Dresden in allen wissenschaftlichen, technischen und organisatorischen Fragen der Arbeit des PET-Zentrums. Ihm gehören an:

Prof. Albert Gjedde	PET-Center des Universitätskrankenhauses Århus
Prof. August Schubiger	PSI Villigen
Prof. Willem Vaalburg	PET-Center der Universität Groningen

## Wissenschaftlich-Technischer Rat

Durch den Wissenschaftlich-Technischen Rat stellt der Vorstand eine angemessene Beteiligung der wissenschaftlichen und technischen Mitarbeiter an der Erarbeitung der wissenschaftlichen und technischen Programme sicher. Dem Wissenschaftlich-Technischen Rat gehören die Direktoren der wissenschaftlichen Institute, Leiter zentraler eigenständiger wissenschaftlich-technischer Abteilungen und gewählte Vertreter der wissenschaftlich-technischen Mitarbeiter des Forschungszentrums an.

Mitglieder des Wissenschaftlich-Technischen Rates:

Prof. Haino Nitsche (Vorsitzender)	Prof. Eckart Grosse	Dr. Hartmut Guratzsch
Dr. Harald Prade (stellv. Vorsitzender)	Dr. Hans-Ulrich Jäger	Dr. Peter Merker
Dr. Ruprecht Fülle	Prof. Bernd Johannsen	Prof. Wolfhard Möller
Dr. Frank Gabriel	Dr. Kari Krognor	Dr. Jörg Steinbach
Prof. Frank-Peter Weiß		

Der Vorstand nimmt an den Sitzungen des Wissenschaftlich-Technischen Rates mit beratender Stimme und der Vorsitzende des Betriebsrates als weiterer Gast teil.

## Betriebsrat

Der Betriebsrat des Forschungszentrums Rossendorf setzt sich wie folgt zusammen:

Siegfried Dienel (Vorsitzender)	Martina Jähnichen	Sabine Pfürtner
Dr. Harald Curian (Stellv. Vorsitzender)	Christian Damm	Bernd Eisold
Steffen Schaller	Bernd Hartmann	Christel Schneiderreit

# ÜBERBLICK 1997

---

<b>Name:</b>	FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF e.V.
<b>Träger:</b>	Freistaat Sachsen, Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
<b>Finanzierung:</b>	Grundfinanzierung: 50% Freistaat Sachsen, 50% Bundesrepublik Deutschland
<b>Planstellen:</b>	432,5; davon 133,5 Wissenschaftlerstellen
<b>Drittmittelstellen:</b> (Ist 1997)	118,1 Personenjahre
<b>Doktoranden:</b>	67 (davon 15 Abschlüsse 1997)
<b>Jahresetat:</b>	85.018 TDM
<b>Sondermittel:</b>	1.606 TDM
<b>Drittmittel:</b>	11.978 TDM
<b>Organe:</b>	Mitgliederversammlung Kuratorium Vorstand Wissenschaftlicher Beirat

## Wissenschaftliche

<b>Institute:</b>	Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie Institut für Radiochemie Institut für Kern- und Hadronenphysik Institut für Sicherheitsforschung
-------------------	--

## Wissenschaftliche

<b>Infrastruktur:</b>	Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik Zentralabteilung Neue Beschleuniger Zentralabteilung Analytik
-----------------------	--

## Technische

<b>Infrastruktur:</b>	Investitionen, Technische Dienste Ordnung und Sicherung Kommunikation und Datenverarbeitung Bibliothek Betriebliche Strahlenschutzüberwachung (Zusammenarbeitsvereinbarung mit VKTA)
-----------------------	--

# ÜBERSICHT ÜBER DIE FORSCHUNGS- SCHWERPUNKTE UND -VORHABEN 1997

## Materialforschung

- Hartstoffschichten FWI
- Halbleitermaterialien FWI
- Nanocluster FWI
- Feinfokussierter Ionenstrahl FWI
- Plasma-Immersions- und Niederenergie-Ionen-Implantation FWI
- Hochenergieionenstrahlphysik FWI
- Materialsicherheit (Versprödungsmechanismen) FWS
- Simulation von Teilchen- und Strahlungsfeldern (Neutronenbelastung) FWS

## Biomedizin-Chemie, Umwelt

- Radiotracerdesign und Radiopharmazie FWB
- Transport und Metabolismus von Radiotracern FWB
- Radiopharmazeutische und biologische Untersuchungen zum serotonergen System FWB
- Dopaminerges System FWB
- Simulation von Teilchen- und Strahlungsfeldern (für PET-Schwerionentherapie) FWS
- Entwicklung und Bau von Detektoren (für PET-Schwerionentherapie) FWK
- Transportverhalten von Radionukliden in der Bio- und Geosphäre FWR
- Physikalisch-chemische Untersuchungen radioaktiver Kolloide und Aerosole FWR
- Wechselwirkung von Radionukliden mit anthropogenen und natürlichen Organika FWR
- Wechselwirkung von Biosorbentien und Mikroorganismen mit Radionukliden und ihre molekulargenetische Charakterisierung FWR
- Strukturaufklärung von Radionuklidverbindungen mittels Synchrotronstrahlung FWR
- Chemie der schwersten Elemente FWR

## Grundlagenforschung zur Kern-, Hadronen und Strahlungsphysik

- Vielteilchentheorie subatomarer Systeme FWK
- Experimentelle Kernstrukturphysik FWK
- Hadronenphysik (Experimentelle Mittelenergiephysik) FWK
- Schwerionenphysik FWK
- Strahlungsphysik und ELBE-Quelle FWK
- Entwicklung und Bau von Detektoren FWK

## Sicherheitsforschung

- Anlagensmodelle für die Störfallanalyse FWS
- Einzelphänomene in Zweiphasenströmungen FWS
- Materialsicherheit FWS
- Mechanisches Verhalten von LWR-Komponenten unter Störfallbedingungen FWS
- Simulation von Teilchen- und Strahlungsfeldern FWS
- Anlagen- und Prozeßüberwachung FWS
- Angewandte Entscheidungsanalyse FWS
- Flüssigmetall-Magnetohydrodynamik FWS

## Projekte

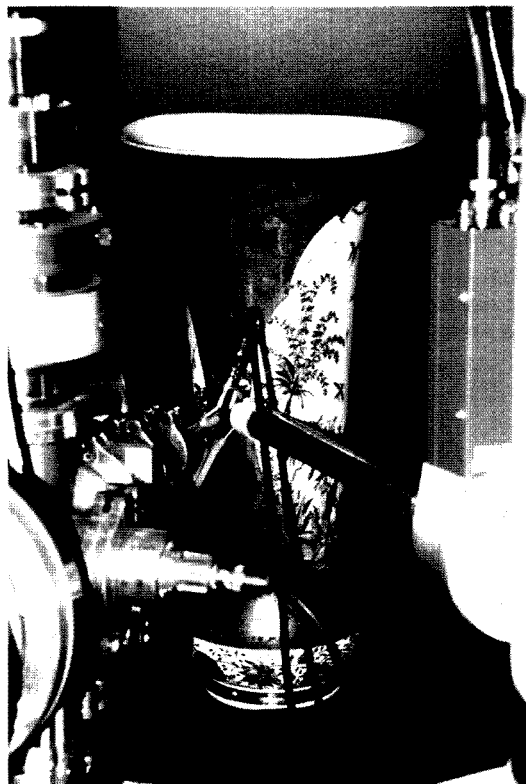
- ESRF-Beamline
- ELBE-Strahlungsquelle

# ÜBERSICHT ÜBER DIE ZENTRUMSÜBERGREIFENDE ZUSAMMENARBEIT

Im Berichtsjahr ist die zentrumsübergreifende Zusammenarbeit weiter intensiviert worden. Dazu hat zum einen beigetragen, daß die wissenschaftlich-technische und methodische Ausstattung der Institute und Zentralabteilungen des Zentrums immer attraktiver für die Durchführung gemeinsamer Forschungsarbeiten und -vorhaben geworden ist. Zum anderen führen zentrumsübergreifende Veranstaltungen zunehmend zum Erkennen von gemeinsamen Interessen und Kooperationsmöglichkeiten. Eine Intensivierung der Zusammenarbeit erfolgte auf allen Schwerpunkts-Arbeitsgebieten des FZR. Verstärkt wurden insbesondere die gemeinsamen Bemühungen zur wissenschaftlichen Vorbereitung und zum Aufbau der ELBE-Strahlungsquelle.

Forschungsschwerpunkt	Gegenstand der Zusammenarbeit	beteiligt sind:
Biomedizin-Chemie, Umwelt	Positronen-Emissions-Tomographie <ul style="list-style-type: none"> <li>• In-situ-PET-Monitoring für die Schwerionen-Tumorthherapie,</li> <li>• PET-Verfahren zur Dichte- und Konzentrationsmessung in der Strömungsmechanik</li> <li>• Entwicklung eines PET-Scanners mit hohem räumlichen Auflösungsvermögen für Studien an kleinen Tiermodellen</li> </ul>	FWK FWB FWS FWN
	Radioaktive Tracer in Bio- und Ökosystemen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Chemie des Technetiums</li> <li>• Molekülstrukturanalyse radioaktiver Verbindungen</li> <li>• Untersuchungen zum Radionuklidtransport</li> <li>• Entwicklung, Herstellung und Anwendung von Zyklotron-Isotopen</li> <li>• Analysen von Gesteinsproben aus Uranerzbergbaugebieten</li> </ul>	FWB FWR FWS FWA FWN FWI
	Medizinische Therapie <ul style="list-style-type: none"> <li>• Charakterisierung von kardiologischen Stents</li> </ul>	FWB FWI
Materialforschung	Strukturuntersuchungen mit Photonen <ul style="list-style-type: none"> <li>• Rossendorfer Beamline ROBL an der ESRF in Grenoble</li> <li>• Feinstrukturuntersuchungen am HASYLAB des DESY/Hamburg und an der ESRF/Grenoble</li> <li>• Röntgendiffraktometrie und -reflektometrie</li> <li>• SiC-Ausheilung mit hochintensiver IR-Strahlung</li> </ul>	FWI FWR FWS FWK FWF FWN FWE
	Verschleiß- und Festigkeitsuntersuchungen an modifizierten Materialien und Werkstoffen	FWS FWI
Grundlagenforschung zur Kern-, Hadronen- und Strahlungsphysik	ELBE-Strahlungsquelle <ul style="list-style-type: none"> <li>• Planung, Design, Aufbau</li> <li>• Wissenschaftliches Programm</li> <li>• Vorbereitung von Experimenten</li> </ul>	FWK FWF FWN FWQ FWI





ÜBERSICHT ÜBER DIE INSTITUTE UND DIE  
WISSENSCHAFTLICH-TECHNISCHE INFRASTRUKTUR

---

Abb. S. 59  
Nicht-destruktive Analyse mit Ionenstrahlen  
hier: Höroldt-Vase (Nationale Kunstsammlung; Porzellansammlung Dresden)

# INSTITUT FÜR IONENSTRAHLPHYSIK UND MATERIALFORSCHUNG

## Überblick über die Zielstellung

Die zentralen Aufgaben des Institutes vereinigen Grundlagen- und anwendungsorientierte Forschung auf den Gebieten der Modifizierung von Oberflächen und der Oberflächenanalytik mittels Ionenstrahlen. Den Empfehlungen des Deutschen Wissenschaftsrates folgend, hat sich das Institut zu einem nationalen Ionenstrahlzentrum entwickelt, welches neben den eigenen Forschungsergebnissen Universitäten, anderen Forschungsinstituten und der Industrie Technologietransfer und Dienstleistungen in Bezug auf Ionenstrahltechniken anbietet.

Für diese Ziele ist ein breites Spektrum von Ionenanlagen verfügbar, die Ionen mit Energien von etwa 10 eV (Plasmabehandlung) bis zu einigen 10 MeV (elektrostatische Beschleuniger) bereitstellen. Für die Diagnostik von Ionenbehandelten Oberflächen sind Standard-Analysetechniken vorhanden, wie Elektronenmikroskopie, Röntgenbeugung, Auger- und Photoelektronenspektroskopie sowie eine Reihe chemischer, optischer, elektrischer und mechanischer Anlagen. Die Probenpräparation ist für eine große Zahl unterschiedlicher Materialien ausgelegt und schließt Standard-techniken der Silizium-Planartechnologie ein.

## Wichtigste Ergebnisse

Die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des Institutes orientieren sich an sechs zentralen Themen aus den Bereichen der „Neuen Materialien“ (Hartstoffschichten, Halbleitermaterialien und Nanocluster) und der „Neuen Verfahren“ (Feinfokussierter Ionenstrahl, Plasma-Immersion- und Niederenergie-Ionenimplantation und Hochenergie-Ionenstrahlanalytik). Aus der großen Zahl neuer und wesentlicher Ergebnisse des Jahres 1997 innerhalb der einzelnen Forschungsvorhaben (s. u.) sind einige hervorzuheben: An Nanocluster-Strukturen, die ausschließlich durch Standard-Prozesse der Silizium-Technologie erzeugt wurden, wurde erstmals eine intensive blaue Elektrolumineszenz beobachtet. In Silizium

wurde nach Ionenimplantation eine neue Art von Defekten gefunden, deren Lage relativ zur Oberfläche nicht mit der Energiedeposition korreliert. In Siliziumkarbid wurden erstmals direkt p-leitende Schichten durch Hochtemperatur-Implantation erzeugt. Die In-situ-Prozessdiagnostik durch Hochenergie-Ionenstrahlanalyse lieferte herausragende neue Resultate zum Verständnis der Oberflächenvorgänge beim Ionennitrieren.

Der Fortschritt des Institutes wird durch eine weiter steigende Zahl von wissenschaftlichen Publikationen, besonders in den renommiertesten internationalen Fachzeitschriften, dokumentiert, die z. T. aus intensiver Zusammenarbeit mit deutschen und ausländischen Partnern resultieren. Entsprechend besuchten zahlreiche Gäste aus dem In- und Ausland das Institut, wie auch seine Mitglieder an anderen Instituten als Gäste begrüßt wurden. Auch eine Reihe von Einladungen zu Vorträgen auf den wichtigsten internationalen Konferenzen des Fachgebiets beweist, daß das Institut sich zunehmend als eine der weltweit führenden Ionenstrahleinrichtungen etabliert.

Dies wird auch dadurch bestätigt, daß dem Institut die Organisation einer der größten internationalen Ionenstrahl-Konferenzen angetragen wurde. Das Institut wird im Sommer 1999 in Dresden die 14. Internationale Konferenz „Ion Beam Analysis“ gemeinsam mit der 6. Europäischen Konferenz „Accelerators in Applied Research and Technology“ ausrichten. Es werden mehr als 400 Teilnehmer erwartet.

1997 organisierte das Institut mit Unterstützung der Fraunhofer-Institute für Werkstoff- und Strahltechnik und für Elektronen- und Plasmatechnik erfolgreich die 8. Bundesdeutsche Fachtagung „Plasmatechnologie“ mit etwa 200 Wissenschaftlern und Ausstellern aus Universitäten, Forschungsinstituten und der Industrie.

Weiterhin wurde gemeinsam mit dem Hahn-Meitner-Institut Berlin eine Sommerschule „Nukleare Sonden und Ionenstrahlen“ in Bad Blankenburg (Thüringen) abgehalten, an der 35 Studenten und 12 Dozenten teilnahmen.

Der wissenschaftliche Erfolg des Institutes gründet sich auch wesentlich auf das Engagement seiner jungen Forscher. 1997 wurden eine Diplomarbeit und acht Doktorarbeiten mit z. T. hervorragenden Resultaten abgeschlossen.

Im Berichtsjahr 1997 wurden eine Reihe neuer Projekte von der DFG, der VW-Stiftung, dem SMWK und dem SMWA, dem BMBF und der EU eingeworben. In einigen dieser Projekte spielt die Kooperation mit der Industrie eine wesentliche Rolle. Die Teilnahme an einem europäischen Netzwerk „Carbon Based Hard Coatings“ wird den Kontakt unserer jungen Wissenschaftler mit dem europäischen Ausland verstärken.

Das Institut ist im Jahre 1997 zunehmend in die Rolle eines überregionalen Ionenstrahlzentrums hineingewachsen. Kooperationen im Bereich der Ionenstrahlanalyse haben ein weites Spektrum von Materialien zum Gegenstand und sind in Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Tribologie, Korrosionsbeständigkeit, Elektronik und Mikrosystemtechnik, Biomedizin, Informationstechnik, Energietechnik, Geologie, Anthropologie und Extrakterrestrik einbezogen. Vom Ionenimplantations-Service des Institutes, einschließlich des fokussierten Ionenstrahles und der Plasma-Immersion-Implantation, profitierten etwa 40 Partner aus Forschung und Industrie.

Das Kleinunternehmen GESIM, das 1995 aus dem Institut ausgegründet worden war, wurde mit dem Innovationspreis der Deutschen Wirtschaft 1997 ausgezeichnet. Prämiert wurde die Entwicklung mikrofluidischer Komponenten („Kleinste Pumpe der Welt“). Die Firma war bis Ende 1997 dem Institut durch gemeinsame Projekte verbunden und nutzt weiterhin einige seiner Einrichtungen.

Die Bauarbeiten am neuen Anbau des Institutes stehen kurz vor dem Abschluß, so daß der Einzug ab März 1998 geplant ist. Der 5-MV-Tandembeschleuniger feierte im Herbst sein 25-jähriges Betriebsjubiläum. Er wurde mit einem neuen Injektorsystem mit verbesserter Transmission ausgestattet, das auch die Montage einer weiteren Ionenquelle erlaubt. Betriebskomfort und -sicherheit wurden durch die Modernisierung des Kontrollpultes und den Austausch mehrerer Netzgeräte weiter verbessert. Für das 300-kV-Transmissions-Elektronenmikroskop wurde eine zweidimen-

sionale CCD-Kamera beschafft. Im Bereich der Plasma-Immersion-Ionenimplantation wurden zwei neue Anlagen mit einem vergrößertem Prozeßvolumen bzw. für die Kombination mit der Schichtabscheidung aus einem gefilterten Vakuumbogen in Betrieb genommen.

### Zentrumsübergreifende Zusammenarbeit

Das Institut errichtet gemeinsam mit dem Institut für Radiochemie und der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik die Rossendorfer Beamline (ROBL) an der European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble (s. S. 88). Das röntgenoptische System sowie ein Sechskreis-Goniometer für die Röntgenbeugung wurden einschließlich der Steuerungs- und Datenerfassungssysteme aufgebaut und in Betrieb genommen. Erste Diffraktionsexperimente wiesen die vorausberechnete hohe Energieauflösung nach.

Die präparativen und analytischen Einrichtungen des Institutes wurden auch von den Nachbarinstituten genutzt. Das Institut für Sicherheitsforschung nutzte die Transmissions-Elektronenmikroskopie des Institutes für die Analyse bestrahlter und unbestrahlter Proben von Reaktorstählen. Besondere Erwähnung verdienen Analysen an Gesteinsproben aus Uranerzbergbaugebieten mittels der protoneninduzierten Röntgenemission (PIXE) in Zusammenarbeit mit dem Institut für Radiochemie. Mit dem Ziel, die Fixierung von Rhenium-Isotopen in kardiologischen Stents zu verbessern, wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie Oberflächen durch Ionenbeschuß konditioniert. Wiederum wurde PIXE zur Kontrolle der Rhenium-Aufnahme eingesetzt. Für zukünftige Experimente am ELBE-Beschleuniger des FZR zur Erzeugung optischer Übergangsstrahlung wurden in Zusammenarbeit mit dem Institut für Kern- und Hadronenphysik dünne Aluminium/Silizium-Sandwichtargets entwickelt und erfolgreich am ELBE-Injektor getestet.

### Zusammenarbeit mit externen Partnern

Alle im folgenden dargestellten Forschungsthemen profitieren von der Zusammenarbeit mit externen Instituten. Für die Entwicklung

von Hartstoffschichten ist der wissenschaftliche Austausch mit dem Fraunhofer-Institut für Werkstoff- und Strahltechnik Dresden, der TU Chemnitz, der Universität Stuttgart sowie den Universitäten Poitiers/Frankreich und Tokio fördernd, die an gleichen oder ähnlichen Systemen mit anderen Methoden arbeiten.

Die Arbeiten zum Gettern und Defektengineering mittels MeV-Implantern sind ohne die enge Zusammenarbeit zu SIMS-Messungen mit Kollegen vom Moskauer Zentrum für Materialanalyse nicht möglich. Die Kooperation mit dem Institut für Angewandte Photophysik der TU Dresden zur Untersuchung der Lumineszenzeigenschaften ionenstrahlsynthetisierter Nanocluster ist von grundsätzlicher Bedeutung. Die Arbeiten zu den attraktiven Anwendungsmöglichkeiten des Ionenmikrostrahls basieren auf Kooperation mit dem FZ Jülich, der Einrichtung der Fraunhofergesellschaft zur Akustischen Diagnose und Qualitätssicherung in Dresden und der Universität Athen. In Anbetracht der Noch-Nicht-Verfügbarkeit eines geeigneten Positronendetektors war die Zusammenarbeit mit Kollegen der Universität Norwich/ Großbritannien von eminenter Bedeutung für die Untersuchungen zur Positronen-Annihilations-Spektroskopie. Die Zuordnung von Positronenlebensdauern zu verschiedenen Leerstellenkomplexen erfolgt in enger Kooperation mit Kollegen der Universität Bilbao. Die Arbeiten zum Siliziumkarbid basieren auf gemeinsamen Arbeiten mit der Universität Barcelona zur Ionenstrahlsynthese von SiC in Si sowie der TU Ilmenau zur Synthese von SiC-AlN-Schichten. Untersuchungen zum Kristallisationsverhalten von amorphen SiC-Schichten leben von einer unverzichtba-

ren Zusammenarbeit mit der Universität Thessaloniki. Die Dotierungsuntersuchungen im SiC werden vor allem durch eine enge vertragliche Kooperation mit dem Daimler-Benz-Forschungszentrum in Frankfurt/Main gefördert.

Kooperationspartner zur theoretischen Modellierung von Halbleiterprozessen sind die ETH Zürich, die Firmen Integrated Systems Engineering Zürich, IBM und Zentrum Mikroelektronik Dresden sowie das Fraunhofer-Institut für Mikroelektronische Schaltungen und Systeme Dresden.

Innerhalb eines EU-Verbundprojektes bestehen Verbindungen zur Universität Leuven/Belgien und zu mehreren Firmen in Europa. Aus den vielfältigen Kooperationen zur Ionenstrahlanalytik sind die gemeinsamen Untersuchungen mit dem Institut für Plasmaphysik Garching an Materialien von Fusionsreaktoren und Analysen von Kunstgegenständen in Zusammenarbeit mit der Hochschule für Bildende Künste Dresden sowie mehreren europäischen Partnern im Rahmen eines COST-Projektes hervorzuheben.

Der Vorbereitung industrieller Nutzungen unserer Ergebnisse dienen die bereits oben erwähnten Kooperationen mit der Robert Bosch GmbH und der MAT GmbH sowie Arbeiten zur Implantation von Gelenkprothesen für die Fa. Aesculap und zur Dotierung von SiC für das Daimler-Benz-Forschungszentrum Frankfurt. Implantationsprozesse für „Sensoren unter extremen Bedingungen“ werden im Rahmen eines BMBF-Projektes gemeinsam mit der FernUniversität Hagen untersucht.

#### Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

- Hartstoffschichten
- Halbleitermaterialien
- Nanocluster
- Feinfokussierter Ionenstrahl
- Plasma-Immersions- und Niederenergie-Ionen-Implantation
- Hochenergie-Ionenstrahlanalytik

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]											
Gesamt			76			Wissenschaftler			32		
Annexpersonal [Anzahl]						Personenjahre					
Postdoc	6	3,9	Doktoranden	5	3,8	Gastwissenschaftler	40	3,4	Hilfskräfte	17	3,9
Drittmittelfinanziertes Personal [Anzahl   Personenjahre]											
Wissenschaftler	11	6,7	Technisches Personal	12	6,7	Gastwissenschaftler	41	4,7	Doktoranden	14	9,8
Student, Hilfskräfte	2	0,2									
Geräteinvestitionen [TDM]											
grundfinanziert			1.608,7			drittmittelfinanziert			399,3		
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]											
Publikationen			111			Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster			139		
Seminare/Kolloquien			51			Reports			8		
Patentmeldungen			5			Doktorarbeiten			8		
Meetings/Workshops			2			Abstracts			35		
Diplomarbeiten			1								

Direktor  
 Prof. Dr. W. Möller    Tel.: (0351) 260-2245    e-Mail: W.Moeller@fz-rossendorf.de

Abteilungsleiter	Abteilung	Tel.	e-Mail
Dr. J. von Borany	Industriekooperation	33 78	J.Borany@fz-rossendorf.de
Dr. M. Friedrich	Beschleunigertechnik	32 84	M.Friedrich@fz-rossendorf.de
Dr. R. Grötzschel	Ionenstrahlanalytik	28 02	R.Groetzschel@fz-rossendorf.de
Dr. W. Matz	Strukturuntersuchungen	31 22	W.Matz@fz-rossendorf.de
Dr. M. Posselt	Theorie	32 79	M.Posselt@fz-rossendorf.de
Dr. E. Richter	Ionenimplantation	33 26	E.Richter@fz-rossendorf.de
Dr. B. Schmidt	Präparation	27 26	B.Schmidt@fz-rossendorf.de
Dr. W. Skorupa	Neue Materialien	36 12	W.Skorupa@fz-rossendorf.de

# INSTITUT FÜR BIOANORGANISCHE UND RADIOPHARMAZEUTISCHE CHEMIE

## Überblick über die Zielstellung

Die Zielstellung des interdisziplinären Instituts leitet sich aus der Bedeutung ab, die radioaktive Substanzen (Radiotracer, Radiopharmaka) in der modernen medizinischen Diagnostik haben. Mit ihrer Hilfe lassen sich in einzigartiger, anderweitig nicht zugänglicher Weise biochemische Zusammenhänge am Patienten durch bildgebende Messung von außen erforschen und für eine Funktionsdiagnostik nutzen. Das Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie befaßt sich mit Grundlagenforschung in bezug auf neue Radiotracer und ist mit seinem radiochemischen, pharmazeutischen und pharmakologischen Programm Partner des medizinischen Bereiches im PET-Zentrum Rossendorf. Dieses, gemeinsam mit der Klinik und Poliklinik für Nuklearmedizin des Universitätsklinikum „Carl Gustav Carus“ der TU Dresden, am FZR betriebene Zentrum orientiert seine Forschungsthemen an den Schwerpunktthemen des Universitätsklinikums und nimmt darüberhinaus als erste Positronen-Emissions-Tomographie-Einrichtung ihrer Art in den neuen Bundesländern auch eine spezielle Aufgabe in der Patientenversorgung wahr.

Zielebene der Tracerentwicklung im Institut bzw. des Tracereinsatzes im PET-Zentrum ist der *molekulare* Bereich mit Targetmolekülen in Form spezifischer Rezeptoren oder anderer spezifischer Bindungspartner. Ausgehend von einem biochemischen Ansatz, d. h. der molekularen Basis physiologischer Vorgänge und deren Beeinträchtigungen bei krankhaften Prozessen, werden neue chemische Verbindungen und Markierungsmethoden erschlossen, die spezielle Chemie der Tracer erforscht und Zusammenhänge zwischen der Molekülstruktur und dem Verhalten im biologischen System abgeleitet. Derzeit stehen Neurotransmitterprozesse des Gehirns im Mittelpunkt, die in noch wenig geklärter Weise bei einer Reihe von Erkrankungen, die eine breitere Bevölkerungsschicht betreffen, beteiligt sind oder zu sein scheinen. Hinsichtlich der Informationsübertragung mittels chemischer Boten-substanzen im Gehirn und deren krankhafter

Störungen sind die Arbeiten auf Rezeptoren und Transporter der beiden Neurotransmitter Serotonin und Dopamin konzentriert. Die Markierungsnuklide für das Radiotracerdesign sind dabei einerseits die Positronenstrahler Kohlenstoff-11 und Fluor-18 und andererseits das „Arbeitspferd“ der Nuklearmedizin, Technetium-99m. Die Forschungsziele zum Technetium-99m basieren auf der großen wissenschaftlichen Herausforderung, das unphysiologische Metall Technetium koordinationschemisch geschickt verpackt als Sonde für biochemische Prozesse im Organismus zu nutzen.

## Wichtigste Ergebnisse

Am 15. Oktober 1997 fand die offizielle Einweihung des gemeinsam mit der Technischen Universität Dresden betriebenen PET-Zentrums Rossendorf statt, nachdem das Zyklotron Anfang des Jahres seinen Routinebetrieb aufgenommen hatte, die neue PET-Kamera installiert und der neue radiopharmazeutische Arbeitsbereich im Gebäude 93 installiert worden sind und die Patientenuntersuchungen erfolgreich angelaufen waren.

Damit ist die gesamte Kette von Radionuklid-erzeugung, Kohlenstoff-11- und Fluor-18-Radiochemie, Tracerentwicklung, Radiopharmakaentwicklung, Routineproduktion und Qualitätskontrolle, für Patientenuntersuchungen und Forschung in anspruchsvoller Weise präsent. Gleichzeitig hat der Wissenschaftliche PET-Beirat seine Arbeit aufgenommen, um insbesondere auch die medizinischen Themen kritisch zu begleiten.

Bei der unmittelbar das Institut betreffenden Forschung ist 1997 eine weitere Konzentrierung auf insgesamt vier Themen erfolgt.

Deren erfolgreiche Bearbeitung erbrachte herausragende Ergebnisse in der radiochemischen Grundlagenforschung, der Entwicklung von Technetiumverbindungen, die zu hochaffinen Bindungen an biologischen Rezeptoren befähigt sind, und der Klärung biochemischer Ursachen bei bestimmten Hirnschädigungen bei Neugeborenen.

Zu diesen Erfolgen zählt ein grundsätzlich neuer Zugang für Markierungen organischer Moleküle mit Fluor-18.

Das am Zyklotron in kleinster Menge und hoher Aktivität ( $>1 \text{ Ci}/10^{-6} \text{ g}$ ) hergestellte [ $^{18}\text{F}$ ] Fluorid konnte mit Hilfe neuer chemischer Reaktionen selbst im trägerarmen Bereich in seinem chemischen Charakter „umgepolt“ werden. Aus dem zuvor nukleophilen Fluorid wird ein elektrophiles Reagenz mit entsprechend neuen Tracersynthesemöglichkeiten.

Erfolgreich fortgeführt wurden auch die Arbeiten, die der Einführung von Kohlenstoff-11 in ungetragener Form in aromatische Ringsysteme dienen.

Hervorragende Ergebnisse wurden bei verschiedenen Technetiumarbeiten erzielt, die alle dem allgemeinen Ziel „von PET zu SPECT“ dienen. Angesichts der Tatsache, daß Tc-99m ein ideales Nuklid für die medizinische Diagnostik ist und damit auf nicht absehbare Zeit das Arbeitspferd der Nuklearmedizin darstellt, wurden neue Synthesebausteine weiter verfeinert und weitere Hürden bei der Entwicklung von Technetium enthaltenden organischen Liganden für biologische Rezeptoren überwunden. Unsere Gruppe nimmt in Anspruch, systematischer und umfangreicher als andere die Entwicklung solcher Tc-Tracer zu betreiben und tiefer in die Zusammenhänge zwischen Struktur und Affinität sowie Durchtritt durch die Blut-Hirn-Schranke einzudringen. Es ist gelungen, auch mit Hilfe von Molecular Modeling, ausgeführt an der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, zu zeigen, daß das Technetium so verpackt werden kann, daß es einen organischen Rezeptorliganden imitiert und in der dem Biochemiker vertrauten Schlüssel-Schloß-Vorstellung paßgenau in die spezifische Bindungstasche des Rezeptors bindet. Dies sind Untersuchungen zu einem Subtyp des Serotoninrezeptors. Neue Wege wurden auch bei verwandten Rezeptoren (Dopaminrezeptoren, Dopamintransporter) und den für die Tumordiagnostik wichtigen Steroidhormonrezeptoren beschritten.

In Vorbereitung auf eine europäische Zusammenarbeit über radioaktive Peptide für die Tumordiagnostik und -therapie ist ein bemerkenswerter methodischer Beitrag zur Metallionen-Bindungsfähigkeit kleiner Peptide geleistet worden. Nachdem zuvor röntgenabsorptionsspektroskopisch erstmalig die Koordi-

nationssphäre bei einem Tc-Peptid-Komplex aufgeklärt werden konnte, ist im vergangenen Jahr die Methode der Kapillarelektrophorese in modifizierter Form auf die Belange der radiopharmazeutischen Chemie angewandt worden. Dadurch und in Kombination mit röntgenabsorptionsspektroskopischen Untersuchungen an Synchrotroneinrichtungen konnte sowohl an Modellpeptiden als auch an nuklearmedizinisch interessanten Peptiden deren komplizierte, vom pH-Wert der Lösung abhängige Komplexbildung detailliert untersucht werden. Aussagen zur Speziation und dem Zusammenwirken der verschiedenen Donor-Atome in Peptiden und der Bausteine bei der Koordinierung von Technetium gehören zu den hervorzuhebenden Ergebnissen.

Experimentelle Untersuchungen zur Hirnschädigung bei Neugeborenen unter Sauerstoffmangel führten in Zusammenarbeit mit der Universität Jena zu der Erkenntnis, daß Änderungen enzymatischer Aktivitäten im dopaminergen System des Gehirns eine wesentliche Rolle spielen. Nach Ausarbeitung von radiochemischen Synthesen für die benötigten Tracer und Erarbeitung einer hochsensitiven Metabolitanalytik mittels HPLC wurden an neugeborenen Ferkeln erste PET-Experimente unter den Bedingungen eines Sauerstoffmangels durchgeführt, wie er bei bestimmten Geburtskomplikationen des Menschen auftritt. Dabei ergaben sich einerseits Hinweise auf eine erhöhte Aktivität des Dopaminsynthetisierenden Enzyms, andererseits auf eine Verminderung der Aktivität des abbauenden Enzyms. Diese Veränderungen werden als eine der Ursachen für den Anstieg der Dopaminkonzentration im Gehirn angesehen; eine Tatsache, von der angenommen wird, daß sie Konsequenzen für die spätere Hirnentwicklung des Menschen hat.

#### Zentrumsübergreifende Zusammenarbeit

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Radiochemie wurde die Anwendung der Röntgenabsorptionsspektroskopie auf radiopharmazeutische Fragestellungen weiter ausgedehnt. Gemeinsame Untersuchungen an externen Synchrotroneinrichtungen haben dabei mit anderen Methoden nicht erhältliche Einblicke in den Molekülaufbau von Tc-Koordinationsverbindungen erbracht. Unter Federführung von Mitarbeitern des Instituts für Kern- und



Hadronenphysik wird die Entwicklung eines PET-Scanners für Kleintiere weiter betrieben. Der angestrebte Hochleistungstomograph soll der experimentellen Pharmakologie einen noch besseren Zugang zu Untersuchungen mit der Positronen-Emissions-Tomographie erschließen.

Mit dem Institut für Sicherheitsforschung gibt es Zusammenarbeit bei speziellen Target- und Traceraufgaben im Rahmen der PET-Anwendung.

#### Zusammenarbeit mit externen Partnern

Auf radiopharmazeutischem Gebiet besteht eine Zusammenarbeit mit dem VKTA Rosendorf. Mit der Technischen Universität Dresden besteht eine vielfältige und sehr enge Zusammenarbeit, insbesondere in dem gemeinsam betriebenen PET-Zentrum. Im Berichtszeitraum ist die Zusammenarbeit mit verschiedenen Kliniken des Universitätsklinikums und medizinischen Einrichtungen in Sachsen intensiviert worden. Chemische Arbeitsgruppen der TU Dresden sind wesentlich an der analytischen Charakterisierung von neuen Tracern einbezogen. Enge Kooperationen bestehen zum Paul-Scherrer-Institut in der Schweiz.

Eine sehr effektive Zusammenarbeit besteht auch mit der Bundesanstalt für Materialforschung Berlin in bezug auf Kristallstrukturuntersuchungen. Langjährige Kooperationen mit

der Universität Padua, Italien, und dem Nationalen Forschungszentrum „Demokritos“ in Athen, Griechenland, dienen einer gemeinsamen Forschung zur Technetiumchemie, koordiniert auch über das COST-B3-Programm. Außerdem ist das Institut über das SOKRATES/ERASMUS-Programm mit der Universität in Padua in der Studenten- und Doktoranden-ausbildung verbunden. Neue Zusammenarbeit wurde mit den Universitäten in Marburg und Düsseldorf sowie dem Karolinska-Institut in Stockholm aufgenommen.

Auf dem Gebiet der PET-Tracer existieren darüber hinaus Kooperationen mit dem Montreal Neurological Institute, Kanada, und dem PET-Zentrum in Turku, Finnland. In die Entwicklung neuer PET-Tracer ist die Kompetenz des Hans-Knöll-Instituts Jena auf dem Gebiet der Steroidforschung eingebunden.

Auf pathophysiologischem Gebiet wird erfolgreich mit der Friedrich-Schiller-Universität Jena zusammengearbeitet.

Die biologische Forschung zu Radiotracern profitiert sehr von der Zusammenarbeit mit dem PET-Zentrum Aarhus, Dänemark, und der Bar-Ilan-Universität in Israel.

Besonders hervorzuheben ist die intensive Zusammenarbeit mit der Pharmaindustrie, insbesondere der Schering AG und Mallinckrodt St. Louis, USA, bzw. Petten, Holland. Gemeinsame Forschungsprojekte betreffen neue Technetiumverbindungen für die nuklearmedizinische Diagnostik.

#### Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

- Radiotracerdesign und Radiopharmazie
- Transport und Metabolismus von Radiotracern
- Radiopharmazeutische und biologische Untersuchungen zum serotonergen System
- Dopaminerges System

Statistischer Überblick

Mitarbeiter (Planstellen)									
Gesamt		37		Wissenschaftler		14			
Arbeitspersonal (Anzahl   Personenjahre)									
Postdoc		3		3,0		Doktoranden		5	
						4,6		8	
						0,3		Hilfskräfte	
								6	
								1,8	
Dr. Mittelfinanziertes Personal (Anzahl   Personenjahre)									
Wissenschaftler		6		4,1		Technisches Personal		1	
								0,2	
								2	
								0,1	
								Doktoranden	
								4	
								2,1	
Erfolgsinvestitionen (EUM)									
grundfinanziert		302,1		dr. Mittelfinanziert		1,5			
Wissenschaftliche Veröffentlichungen (Anzahl)									
Publikationen		18		Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster		51			
Seminare/Kolloquien		13		Reports		1			
Patentanmeldungen		2		Doktorarbeiten		-			
Meetings/Workshops		4		Abstracts		14			
Diplomarbeiten		1							

Direktor Prof. Dr. B. Johannsen Tel.: (0351) 260-3170 e-Mail: B.Johannsen@fz-rossendorf.de

Abteilungsleiter Dr. H. Spies  
 Dr. J. Steinbach  
 Dr. P. Brust  
 Abteilung SPECT-Tracer  
 PET-Tracer  
 Biochemie  
 3678 H. Spies@fz-rossendorf.de  
 2760 J. Steinbach@fz-rossendorf.de  
 3452 P. Brust@fz-rossendorf.de  
 e-Mail

## Überblick über die Zielstellung

Die wissenschaftliche Zielstellung des Instituts für Radiochemie ist auf die Erforschung aller wesentlichen Aspekte des Radionuklidtransports in der Geo- und Biosphäre fokussiert.

Dieser Transport wurde bisher meist nur makroskopisch beobachtet und phänomenologisch beschrieben. Ein grundlegendes Forschungsziel des Instituts ist es, die ablaufenden Vorgänge in Einzelprozesse zu zerlegen und diese auf molekularer Ebene aufzuklären. Unter Verwendung bestehender und noch zu entwickelnder Transportmodelle wird es möglich, aus der mikroskopischen Information makroskopische Voraussagen abzuleiten. Für die Grundlagenforschung ergeben sich daraus methodische Ansätze, besonders im Hinblick auf die Bestimmung der Speziation und Migration der radioaktiven Inhaltsstoffe und weiterer relevanter Schwermetalle auch unter dem Aspekt der Wechselwirkung mit anthropogenen und natürlichen Organika und des Einflusses von Mikroorganismen.

Die Forschung umfaßt insbesondere die Beschreibung der Ausbreitung radioaktiver Stoffe über Grund- und Oberflächenwässer. Es werden unter anderem die Wechselwirkungen an der Phasengrenzfläche zwischen wässriger Phase und Gesteinen, Mineralien und Erden, die Bildung und Ausbreitung von Kolloiden sowie die Mobilisierung oder Retardierung der Radionuklide untersucht. Dabei stehen die Laborexperimente mit den Experimenten im Feld in engem Zusammenhang.

Auf der Basis der erarbeiteten Grundlagendaten können verbesserte Voraussagemethoden für die Radionuklidmigration geschaffen werden. Diese Voraussagen sind wesentlich für die Entwicklung geeigneter Sanierungstechnologien für kontaminierte Flächen, die zum Beispiel als Altlasten des Uranerzbergbaus in Sachsen und Thüringen, als weitflächige Kontaminationen in den Nachfolgestaaten der früheren Sowjetunion und in den USA, resultierend aus der Kernwaffenentwicklung und -produktion, und als kontaminierte Gebiete durch Nuklearunfälle vorliegen. Weiterhin ist eine umfassende Kenntnis der Radio-

nuklidmigration wesentlich für eine Abschätzung der ökologischen Konsequenzen für Mensch und Umwelt vor und nach einer Sanierungsmaßnahme und als Grundlage für die Risikoanalyse von nuklearen Endlagern.

Das Institut führt mikrobiologische Forschungen durch, deren Ziel es ist, die Wechselwirkungen von Mikroorganismen mit natürlichen Radionukliden hinsichtlich ihres Ausbreitungsverhalten und der Erarbeitung von Bioremediationsverfahren aufzuklären.

## Wichtigste Ergebnisse

Die Erarbeitung von Grundlagendaten, die der besseren Beschreibung des Radionuklid- und Schadstofftransports in der Bio- und Geosphäre dienen, stand auch im Berichtszeitraum im Mittelpunkt der Forschungsarbeiten. Im Jahresbericht des Instituts (Annual Report 1997) sind die wissenschaftlichen Ergebnisse detailliert dargestellt.

Hervorzuhebende Ergebnisse sind auf dem Gebiet der Synthese und der Wechselwirkung von Huminsäuren mit Uran zu verzeichnen. Es wurden mehrere, an funktionellen Gruppen chemisch veränderte synthetische Huminsäuren präpariert und zum Studium des Wechselwirkungsverhaltens, in Abhängigkeit der verfügbaren funktionellen Gruppen, eingesetzt. Die Übereinstimmung der Komplexbildungskonstanten und Beladungskapazitäten von natürlicher und unblockierter, synthetischer Huminsäure zeigt die Richtigkeit dieses Forschungsansatzes.

Die Bindungsaffinität untersuchter Metallkationen zu diesen Huminsäuren fällt in der Reihenfolge  $\text{Fe}^{3+} > \text{UO}_2^{2+} > \text{Ca}^{2+}$ , was Rückschlüsse auf den Austausch und das Migrationsverhalten dieser Metalle unter Umweltbedingungen zuläßt. Erstmals durchgeführte spektroskopische Untersuchungen im fernen Infrarot von Uranyl- und Eisenkomplexen der Huminsäuren weisen auf eine chemisch unterschiedliche Anbindung hin. Durch die Kombination der Methode der Photonenkorrelationspektroskopie mit der Rasterkraftmikroskopie gelang es in Zusammenarbeit mit der TU Dresden erstmalig, Huminsäurekolloide hinsichtlich ihrer Größe und Gestalt als Funk-

tion des pH-Wertes zu charakterisieren. Mittels elektrochemischer und spektroskopischer Methoden wurde der Einfluß der organischen Wasserinhaltsstoffe Lignin und Huminsäure auf den Valenzzustand des gelösten Eisens als redoxpotentialbestimmender Komponente im Grubenflutungswasser untersucht. Dabei wurde festgestellt, daß in saurer Lösung eine deutliche Fe(III)-Reduktion stattfindet und daß das Redoxpotential des Lignins merklich unter dem Standardpotential des Redoxpaares Fe(III)/Fe(II) liegt. Diese Ergebnisse weisen darauf hin, daß die durch den Holzabbau induzierten Redoxvorgänge in den gefluteten Gruben infolge der damit verbundenen Speziationsänderung der Schwermetalle Auswirkungen auf deren Transportverhalten haben können. Ein weiteres wesentliches Ergebnis der Arbeiten 1997 war die Installation der laserinduzierten photoakustischen Spektroskopie für Untersuchungen in umweltrelevanten Konzentrationsbereichen. Dies ist insbesondere deshalb notwendig, weil der Großteil der verschiedenen Carbonatkomplexe des Urans keinerlei Fluoreszenzeigenschaften aufweist. So wurde z. B. die Komplexbildungskonstante des Uranyltriscarbonatkomplexes bestimmt. Es konnte direkt nachgewiesen werden, daß das Uran im Wasser des Absetzbeckens Helmsdorf der Uranaufbereitungsanlage Crossen als Uranyltriscarbonatkomplex vorliegt. Um grundlegend den Einfluß des in allen Uranerzbergbauabwässern gelösten Arsens auf die Speziation des Urans zu bestimmen, wurden mittels zeitaufgelöster laserinduzierter Fluoreszenzspektroskopie erstmalig die Komplexbildungskonstanten für die Uranyl-Arsenatkomplexe bestimmt. Diese Werte werden in die internationalen Datenbanken integriert und verbessern die thermodynamischen Speziationsrechnungen.

Der Forschungsansatz, daß von kontaminierten Uranhalde isolierte Bakterien durch ihre Umwelanpassung auch ein hohes Uranaufnahmevermögen haben sollten, zeigte erste erfolgversprechende Ergebnisse. Aus Bodenproben einer Gesteinshalde des ehemaligen Uranerzbergbaues (Haberland-Halde) wurden Gram-negative (*Desulfovibrio*) sowie Gram-positive (*Bacillus*) Bakterienstämme isoliert. Viele der *Desulfovibrio*-Isolate liegen noch als Mischkulturen vor. Die ersten Ergebnisse der Bakterientypisierung zeigen, daß sich eine der bisher isolierten *Desulfovibrio*-Reinkulturen von den 23 bekannten *Desulfovibrio*-Referenz-

stämmen unterscheidet. Dieser Stamm zeigt eine sehr hohe Uran-Reduktionskapazität. Die Reduktion des U(VI) zu U(IV) in den Bakterien konnte mittels XANES-Untersuchungen eindeutig nachgewiesen werden. Drei der über 100 *Bacillus*-Isolate weisen Ähnlichkeiten zu *Bacillus sphaericus*, *Bacillus megaterium* und *Bacillus cereus* auf. Diese Stämme zeichnen sich ebenfalls durch eine hohe Bindungskapazität zu Uran aus.

Im Rahmen des EU-Projektes RESTRAT wurden bestehende Modelle zur langfristigen Risikoabschätzung verbessert, indem Oberflächenkomplexierungsmodelle in die Programme implementiert wurden. Diese Programmeinheit wird nun zur Abschätzung des Strahlenrisikos in fünf kontaminierten Arealen in Belgien, Großbritannien und Schweden eingesetzt.

Die Arbeiten zum Forschungsvorhaben Chemie der schwersten Elemente konzentrierten sich auf Entwicklungsarbeiten zur chemischen Charakterisierung des Seaborgiums (Sg) als Oxidhydroxid. Es wurden die Voraussetzungen für den Einsatz der gaschemischen Charakterisierung bei den nächsten Seaborgium-Experimenten am UNILAC der GSI geschaffen. Frau Dr. A. Vahle wurde für ihre herausragende Promotionsarbeit zum Thema „Hochtemperaturchromatographie mit Spuren Mengen der Homologen des Elements 106 (Sg) im  $O_2 - H_2O_{(g)} / SiO_{2(s)}$ -System“ mit dem Georg-Helm-Preis der TU Dresden und dem Doktorandenpreis 1997 der Wissenschaftsgemeinschaft „Blaue Liste“ (jetzt Gottfried-Wilhelm-Leibniz-Gesellschaft) ausgezeichnet.

Festgestellte bauliche Mängel des neuen Radiochemischen Laborgebäudes verzögerten weiter die Genehmigungserteilung. Durch entsprechende Kooperationen mit befreundeten Instituten konnte der Ausfall an Laborkapazität für Forschungen mit den höheren Aktiniden zwar nicht ausgeglichen, aber doch begrenzt werden. Planmäßig verlief der Aufbau des Radiochemie-meßplatzes am Strahlrohr ROBL der ESRF. Das umfangreiche sicherheitsrelevante Lüftungs- und Abluftmonitoringsystem konnte erfolgreich in Betrieb genommen werden. In enger Kooperation mit der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik des FZR wurden erste, in der Glovebox installierte Komponenten unter inaktiven Bedingungen getestet.

## Zentrumsübergreifende Zusammenarbeit

Innerhalb der zentrumsübergreifenden Forschungs- und Entwicklungsarbeit steht weiterhin der Aufbau des Strahlrohres ROBL an der ESRF, der in enger Kooperation zwischen dem Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, dem Institut für Radiochemie und der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik erfolgt, im Mittelpunkt. Ein wesentliches Ziel der Zusammenarbeit mit dem Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung ist die umfassende Charakterisierung des untersuchten Geomaterials, synthetisierter Modellverbindungen und Partikel, die eine unabdingbare Voraussetzung für das Studium des Sorptionsverhaltens von Aktiniden an diesen Materialien bildet. Die Bewertung von physiko-chemischen Daten und Modellen hinsichtlich der Beschreibung des Urantransportes in Bergbauhalden ist das Thema der Zusammenarbeit mit dem Institut für Sicherheitsforschung und der Zentralabteilung Analytik.

Zur Erzeugung von kurzlebigen Molybdän- und Wolframisotopen am Zyklotron U-120 für Modellexperimente zur chemischen Charakterisierung des Seaborgiums ist die enge Kooperation mit der Zentralabteilung Neue Beschleuniger unabdingbar. Notwendige Untersuchungen zur Oxidationsstufe von Arsen in Modellösungen wurden innerhalb der Ermittlung der Uran-Arsenat-Komplexierung in Zusammenarbeit mit dem Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie durchgeführt. Mit diesem Institut wurden auch EXAFS-Strukturuntersuchungen an neuartigen Technetiumnitridokomplexen gemeinsam am SSRL ausgeführt.

## Zusammenarbeit mit externen Partnern

Die EXAFS-Messungen von umweltrelevanten Radionuklidverbindungen am SSRL wurden in bewährter Weise mit der Actinide Chemistry Group des LBNL durchgeführt.

In Zusammenarbeit mit Physikern der Katholischen Universität Leuven wurden XANES-Messungen von  $U(In_{1-x}Sn_x)_3$  Legierungen am HASYLAB durchgeführt. Die Bestimmung des Oxidationszustandes von Uran sollte zur Klärung der magnetischen Spinstruktur der Legierungen beitragen.

Äußerst intensiv ist die wissenschaftliche Kooperation mit verschiedensten Instituten der TU Dresden.

Im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem Institut für Anorganische Chemie wurden  $V_{1-x}Nb_xO_2$ -Mischkristalle untersucht und mittels XANES Spektroskopie die systematische Änderung der Oxidationsstufe des Niobs als Funktion der Vanadinkonzentration bestimmt.

Forschungen auf den Gebieten der Modellierung von Alpha-Spektren (Institut für Strahlenschutzphysik), Visualisierung von Kolloiden (Institut für Werkstoffwissenschaften), des Transfers von Radionukliden vom Boden zur Pflanze (Institut für Pflanzen- und Holzchemie und VKTA e. V.) sind weitere Beispiele.

Auf den Gebieten der Gesteinscharakterisierung und hydrogeologischer Fragestellungen wird mit verschiedenen Instituten der TU Bergakademie Freiberg zusammengearbeitet.

Die mikrobiologischen Arbeiten erfolgten in enger Zusammenarbeit mit dem Umweltforschungszentrum Leipzig und Wissenschaftlern von verschiedenen Instituten der Bulgarischen Akademie der Wissenschaften.

Mit russischen Wissenschaftlern des Kurchatov- und des Kurnakov-Instituts in Moskau wurde die Komplexbildung von Eisen und Calcium mit natürlichen und künstlichen Huminsäuren mit Hilfe der Elektronenspektroskopie für die chemische Analyse (ESCA) untersucht.

Innerhalb der drei EU-Projekte zu den Themen „Einfluß von Huminstoffen auf den Transport von Radionukliden“, „Erarbeitung von Sanierungsstrategien für radioaktiv belastete Flächen (RESTRAT)“ und Erarbeitung einer „Thermodynamischen Datenbasis zur Umweltmodellierung (JETDEM)“ wird mit 16 verschiedenen Instituten aus 7 europäischen Ländern kooperiert. Der Einfluß von Huminstoffen auf das Migrationsverhalten radioaktiver und nichtradioaktiver Stoffe unter naturnahen Bedingungen ist das Thema der Zusammenarbeit mit dem Institut für Kernchemie der Universität Mainz, dem Anorganischen und Analytischen Institut der Universität des Saarlandes und dem Institut für Nukleare Entsorgungstechnik des Forschungszentrums Karlsruhe.

Die Arbeiten zur Chemie des Seaborgiums sind in eine internationale Kollaboration integriert, die getragen wird von der GSI Darmstadt, der Universität Mainz, dem PSI Villigen und dem VIK Dubna.

## Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

- Transportverhalten von Radionukliden in der Bio- und Geosphäre
- Physikalisch-chemische Untersuchungen radioaktiver Kolloide und Aerosole
- Wechselwirkung von Radionukliden mit anthropogenen und natürlichen Organika
- Wechselwirkung von Biosorbentien und Mikroorganismen mit Radionukliden und ihre molekular-genetische Charakterisierung
- Strukturaufklärung von Radionuklidverbindungen mittels Synchrotronstrahlung
- Chemie der schwersten Elemente

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]											
Gesamt			31			Wissenschaftler			13		
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]											
Postdoc	5	3,5	Doktoranden	4	2,6	Gastwissenschaftler	9	0,9	Hilfskräfte	4	1,4
Drittmittelfinanziertes Personal [Anzahl   Personenjahre]											
Wissenschaftler	16	10,2	Technisches Personal	5	3,0	Gastwissenschaftler	5	0,4	Doktoranden	7	4,7
Studentische Hilfskr.	9	2,3									
Geräteinvestitionen [TDM]											
grundfinanziert			844,9			drittmittelfinanziert			28,5		
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]											
Publikationen			33			Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster			72		
Seminare/Kolloquien			20			Reports			5		
Patentanmeldungen			1			Doktorarbeiten			3		
Meetings/Workshops			4			Abstracts			35		
Diplomarbeiten			1								

Direktor

Prof. Dr. H. Nitsche Tel.: (0351) 260-32 10

e-Mail: H.Nitsche@fz-rossendorf.de

Abteilungsleiter	Abteilung	Tel.	e-Mail
Dr. G. Bernhard	Entsorgungs- und Ökoradiochemie	3280	G.Bernhard@fz-rossendorf.de
Dr. K.-H. Heise	Organische Tracerchemie	2712	H.Heise@fz-rossendorf.de
Dr. T. Reich	Synchrotronstrahlungsanwendungen	2739	T.Reich@fz-rossendorf.de
Dr. P. Merker	Kolloide und Aerosole	3156	P.Merker@fz-rossendorf.de
B. Eisold	Radioaktive Arbeitstechniken	3617	B.Eisold@fz-rossendorf.de

## Überblick über die Zielstellung

Im Institut für Kern- und Hadronenphysik wird einerseits Grundlagenforschung in den Bereichen Hadronen-, Kern- und Strahlungsphysik betrieben, andererseits wird die Übertragungsmöglichkeit von deren Methoden und Ergebnissen in Gebiete außerhalb der subatomaren Physik untersucht. So ist der Atomkern als mesoskopisches System von spinbehafteten Konstituenten ein Modell für atomare und molekulare Cluster, bei deren numerischer Modellierung die vielfältigen Methoden der theoretischen Kernphysik einen wichtigen Beitrag leisten. Die Dynamik von Nichtgleichgewichtssystemen und die Kopplung solcher Systeme an elektromagnetische Strahlung wird für hadronische und nukleare Prozesse intensiv untersucht. Eine Übertragung der entsprechenden Verfahren und Resultate z. B. auf das Verhalten kondensierter Materie in einem intensiven Infrarot-Strahlungsfeld spielt dabei eine zunehmend wichtige Rolle. Im experimentell-technologischen Bereich ist die Ähnlichkeit der kernphysikalischen Beschleuniger- und Detekorteknologie mit den Experimentiermethoden am Infrarot-, am Röntgen- und am Elektronenstrahl so groß, daß die wissenschaftlichen Mitarbeiter des Instituts mit der ihnen zur Verfügung stehenden Infrastruktur sofort wichtige Beiträge in diesem Bereich und damit zum Projekt Strahlungsquelle ELBE leisten können. Daß auch im Bereich der ELBE-Physik die wichtigen Experimente noch an auswärtigen Anlagen durchgeführt werden müssen – so wie es die Kern- und Hadronenphysik seit langem kennt – ist dabei eher von Vorteil, da sich so Erfahrungen und Kontakte ergeben, die für den Aufbau in Rossendorf wichtig sind.

## Wichtigste Ergebnisse

Neben den kern- und hadronenphysikalischen Arbeiten des Instituts haben die Vorbereitungen für den Bau und die Nutzung der Strahlungsquelle ELBE mit dem Freie-Elektronen-Laser (FEL) für das Infrarot (IR) im Berichtszeitraum große Bedeutung gewonnen. Für die Vorbereitungen des Aufbaus von ELBE wurden detaillierte Strahldynamikrechnungen durchgeführt, die der Optimierung der Elektronenstrahlführung zu den Anlagen für die Sekundärstrahlerzeugung dienten. Besonders

wichtig ist eine solche Optimierung im Fall des FEL für die Erzeugung von Infrarotlicht im mittleren Wellenlängenbereich (5 - 30  $\mu\text{m}$ ). Sowohl die von Januar bis Mai 1997 laufende Seminarreihe „Strahlungsquelle ELBE“ als auch das zweitägige FEL-Nutzertreffen im Dezember 1997 haben vielfältige Möglichkeiten für die grundlagen- und anwendungsorientierte Forschung an ELBE aufgezeigt, internationale und nationale Kooperationsmöglichkeiten erschlossen sowie externe und interne Interessenten ausführlich über das ELBE-Projekt informiert.

Hervorzuheben sind außerdem erste IR-FEL-Experimente am Felix-Laboratorium in Rijnhuizen (Niederlande) und die darauf aufbauende Vorbereitung von zwei Experimentvorschlägen. Sie befassen sich mit Untersuchungen zur Anregung von molekularen Schwingungen in SiC, die für das Ausheilen von Kristalldefekten wichtig sind, sowie mit der Temperaturabhängigkeit der IR-Absorption in Hochtemperatursupraleitern. Bei der Erforschung nichtkonventioneller Photonenquellen konzentrieren sich die experimentellen und inzwischen auch theoretischen Arbeiten der Abteilung Strahlungsphysik auf die Channelingstrahlung, da davon die höchsten Intensitäten an weicher Röntgenstrahlung an ELBE erwartet werden. Nachdem 1997 die notwendigen methodischen Vorarbeiten geleistet wurden, sind dazu für 1998 weitere Experimente am S-DALINAC in Darmstadt geplant.

Für die Vervollkommnung der PET-Simultankontrolle der Schwerionen-Tumorbestrahlung wurden im Jahre 1997 die Methoden zur Anwendung von PET für die Dosislokalisation unter dem Aspekt ihres klinischen Einsatzes weiter ausgearbeitet und in Phantom- sowie Tierexperimenten getestet. Dies mündete schließlich im Dezember 1997 im erfolgreichen Einsatz der Rossendorfer PET-Kamera während der ersten Bestrahlung von zwei Patienten mit Kohlenstoffstrahlen bei der GSI Darmstadt.

Zentraler Aspekt der Arbeiten im Detektorlabor war auch im Jahre 1997 die Fertigung großer Gasdetektoren für kernphysikalische Experimente an auswärtigen Beschleunigern. Das betrifft Vieldrahtkammern für das ANKE-Spek-

trometer an COSY des FZ Jülich sowie spezielle Driftkammern für das HADES-Spektrometer am SIS der GSI. Neben der ersten Stop- und zweiten Start-Drahtkammer für das ANKE-Spektrometer wurde 1997 weiterhin das einlagige Barrelhodoskop des Flugzeitspektrometers TOF in Rossendorf fertiggestellt, getestet, am Synchrotron COSY in Jülich aufgebaut und in ersten Messungen von Proton-Proton-Reaktionen eingesetzt (z. B.  $pp \rightarrow pn\pi^+$ ). Komplementär zu COSY-Experimenten wurden unter Rossendorfer Beteiligung an den Detektoranlagen KaoS und FOPI an der GSI Darmstadt die Bedeutung des Freiheitsgrades „Seltsamkeit“ in Schwerionenreaktionen untersucht. Die Analysen von Zweiteilchen-Korrelationen zur Untersuchung des Mechanismus von Schwerionenreaktionen wurden abschließend publiziert.

Die Theoriegruppe hat ein Modell zur Beschreibung der Reaktion  $pp \rightarrow ppy$  ausgearbeitet und publiziert. Weitere Untersuchungen betrafen die Erzeugung von „Seltsamkeit“ in  $pp$ -Reaktionen und in Kernmaterie, den Einfluß von seltsamen Quarks auf die Zustandsgleichung, den Einfluß der elektromagnetischen Wechselwirkung auf Zweiteilchen-Korrelationen, spezielle Hadronenreaktionen (etwa elastische Proton-Deuteron-Rückwärtsstreuung) und insbesondere elektromagnetische Strahlung sowie Dileptonen aus hochenergetischen Schwerionenreaktionen. Mit diesen theoretischen Arbeiten und den oben erwähnten Detektorentwicklungen für HADES, dem High-Acceptance-Di-Electron-Spektrometer bei GSI, wird eine substantielle Beteiligung der Rossendorfer Hadronenphysiker an diesem für die Zukunft der Hadronenphysik besonders wichtigen europäischen Großprojekt erreicht.

In theoretischen Untersuchungen zu Vielteilchensystemen konnte 1997 nachgewiesen werden, daß sowohl die in schnell rotierenden Atomkernen beobachteten systematischen Abweichungen der Meßwerte vom Rotatormodell als auch das Verhalten des Bahnmagnetismus in Metallclustern und in Quantendots auf ein und denselben Quantenprozeß, nämlich die Induktion von Elementarströmen, zurückgeführt werden können. Bei Atomkernen steht dieses Resultat im Widerspruch zu den traditionellen Vorstellungen zum Ursprung der kollektiven Kernrotation. Das universelle Rechenprogramm „Overlap“, das

1997 fertiggestellt worden ist, erlaubt erstmalig Übergangseigenschaften zwischen unterschiedlichen Quasiteilchen-Konfigurationen von Kernen zu berechnen. In einem dedizierten Experiment am Spektrometer GASP im LNL Legnaro (Italien) konnte nachgewiesen werden, daß in mittelschweren Kernen ( $A \approx 80$ ) bisher unbekannte Kollektivzustände auftreten, die man als magnetische Rotation interpretieren kann. In einem Kernresonanzfluoreszenz-Experiment am S-DALINAC wurde der magische  $N=50$  Kern  $^{86}\text{Sr}$  mit der Zielstellung untersucht, den von der Theorie erwarteten Quadrupol-Oktupol-Zweiphononenzustand eindeutig zuzuordnen sowie bisher nicht bekannte mögliche Dreiphononenzustände und deren Abregungsmodi zu finden. Diese  $(\gamma, \gamma')$ -Experimente sind wichtig für die Vorbereitung künftiger Kernstruktur-Untersuchungen am Photonenstrahl von ELBE.

Kurz vor der Rückkehr der langfristig nach Dubna entsandten Mitarbeiter des Institutes wurde im April 1997 eine – aus Rossendorfer Sicht – abschließende Experimentreihe zum FOBOS-Projekt durchgeführt. Die gewonnenen Daten aus dem Beschuß von  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{248}\text{Cu}$  und natürlichem Silber mit Argon-40-Ionen werden gegenwärtig insbesondere im Hinblick auf die Kernspaltung in drei große Fragmente ausgewertet. Die bisherigen FZR-Mitarbeiter an FOBOS wurden in der zweiten Jahreshälfte in Aufgabenstellungen für den Bau und die Nutzung der Strahlungsquelle ELBE eingebunden.

### Zentrumsübergreifende Zusammenarbeit

Die Zusammenarbeit des Instituts mit Partnern im Forschungszentrum betrifft in erster Linie die Kooperation mit den Zentralabteilungen Forschungs- und Informationstechnik und Neue Beschleuniger sowie der Hauptabteilung Technische Infrastruktur im Rahmen des Projektes „Strahlungsquelle ELBE“. Im Ergebnis dieser Zusammenarbeit wurden insbesondere die detaillierte Gebäudekonzeption, der Aufbau der Strahlführung und die Konzeption für den Aufbau der FEL-Anlage zur Erzeugung von Infrarotstrahlung an ELBE erarbeitet. Darüber hinaus sind der Aufbau und die Nutzung des Quellenversuchsstandes zum Test des cw-Injektors ein beachtetes Ergebnis der genannten Zusammenarbeit. Die enge Kooperation drückt sich auch in einer Reihe gemeinsamer Seminare und Arbeitsbesprechungen aus.



Die begonnenen Infrarot-Experimente zur Untersuchung von Vibrationsmoden in SiC an FELIX (Utrecht) werden vom Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung durch fachliche Diskussionen und die Präparation von Proben stark unterstützt.

Eine thematische Verbindung des Instituts mit dem Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie sowie dem Institut für Sicherheitsforschung gibt es bei Arbeiten zum Einsatz der Positronen-Emissions-Tomographie. In Zusammenarbeit mit dem Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie und Partnern aus der Medizin wurden die Arbeiten zum Design eines PET-Scanners mit hohem räumlichen Auflösungsvermögen für Studien an kleinen Tiermodellen fortgesetzt, insbesondere sind weitere Untersuchungen zu geeigneten Szintillationsmaterialien durchgeführt worden.

Methodische Arbeiten des Instituts für Sicherheitsforschung zum Einsatz von PET für die Diagnostik in technischen Systemen wurden durch die Bereitstellung der Infrastruktur des Detektorlabors und die Betreuung der dort durchgeführten Experimente unterstützt. Kürzlich wurden gemeinsam mit diesem Institut Rechnungen zur bremsstrahlungsinduzierten Neutronenerzeugung begonnen.

### Zusammenarbeit mit externen Partnern

Im Bereich der Kernphysik spielt die internationale Kooperation im Rahmen des EURO-BALL-Projekts eine herausragende Rolle. In der Hadronenphysik ist die Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Jülich, der GSI Darmstadt und mit den an den dortigen Anlagen arbeitenden anderen externen Gruppen essentiell. Die Vorbereitungsarbeiten zum Bau und zur Nutzung der Strahlungsquelle ELBE haben entscheidend von der engen Zusammenarbeit mit der TU Darmstadt, mit DESY in Hamburg und mit der Stanford University profitiert. Die Zusammenarbeit mit der FEL-Anlage FELIX (Utrecht) wurde durch den Beginn von IR-Experimenten vertieft, die vom FZR vorgeschlagen wurden.

In Zusammenarbeit mit Mitarbeitern des Instituts für Nuklearmedizin des Universitätsklinikums Dresden wurden gammaspektroskopische Messungen von möglichen Proben für die Photon-Aktivierungs-Therapie durchgeführt. Hierbei wurde untersucht, ob bestimmte Substanzen (Jod- bzw. Platinverbindungen) durch übliche Radionuklide wie  $^{131}\text{J}$  und  $^{169}\text{Er}$  zur Emission von Auger-Elektronen bzw. charakteristischer Röntgenstrahlung angeregt werden.

Im Bereich der Infrarotphysik hat es bei dem FEL-Nutzertreffen am 10. und 11. Dezember vielfältige Kontakte gegeben, die für die zukünftige Zusammenarbeit mit externen Partnern von großer Bedeutung sind.

### Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

- Vielteilchentheorie subatomarer Systeme
- Experimentelle Kernstrukturphysik
- Hadronenphysik (Experimentelle Mittelenergiephysik)
- Schwerionenphysik
- Strahlungsphysik und ELBE-Quelle
- Entwicklung und Bau von Detektoren (sowie der Einsatz von PET bei der Schwerionen-Tumortherapie)

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter (Planstellen)											
Gesamt		50				Wissenschaftler			22		
Anexpersonal [Anzahl   Personenjahre]											
Postdoc	7	3,6	Doktoranden	3	2,0	Gastwissenschaftler	26	1,6	Hilfskräfte	2	0,3
Drittmittelfinanziertes Personal [Anzahl   Personenjahre]											
Wissenschaftler	14	10,2	Technisches Personal			Gastwissenschaftler	8	0,7	Doktoranden	11	7,7
Geräteinvestitionen [TDM]											
grundfinanziert		847,8				drittmittelfinanziert			467,5		
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]											
Publikationen		49				Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster			74		
Seminare/Kolloquien		49				Reports			11		
Meetings/Workshops		2				Doktorarbeiten			2		

Direktor

Prof. Dr. E. Grosse Tel.: (0351) 260-2270

e-Mail: E.Grosse@fz-rossendorf.de

Abteilungsleiter

Abteilung

Tel.

e-Mail

Prof. E. Grosse

Hadronenphysik

2270

E.Grosse@fz-rossendorf.de

Dr. F. Dönau

Kernphysik

3372

F.Doenau@fz-rossendorf.de

Dr. H. Prade

Strahlungsphysik

3270

H.Prade@fz-rossendorf.de

## Überblick und Zielstellung

Die Forschung des Institutes ist auf die Bewertung und Erhöhung der Sicherheit risikoträchtiger Anlagen gerichtet. Untersucht werden gleichermaßen kerntechnische und verfahrenstechnische Einrichtungen.

Zur Analyse der thermofluidodynamischen Phänomene bei Störfallabläufen sind physikalische Modelle und Computercodes für Mehrphasen- und Mehrkomponentenströmungen sowie für die orts- und zeitabhängige Leistungsfreisetzung (Neutronenkinetik bei Leichtwasserreaktoren bzw. Reaktionskinetik für exotherme chemische Reaktionen) zu entwickeln. Die Schwerpunkte liegen auf der Beschreibung räumlich mehrdimensionaler Strömungseffekte und der zeitlichen Veränderung der Strömungsformen. Zur weiteren Qualifizierung der theoretischen Arbeiten sind vertiefende experimentelle Untersuchungen künftig unumgänglich. Dies gilt für die chemische Verfahrenstechnik wie für die grundlegenden Untersuchungen zur Thermofluidodynamik. Deshalb plant das Institut, in den nächsten Jahren eine größere Versuchsanlage zur Untersuchung transientscher Strömungsphänomene aufzubauen. Durch die Entwicklung von Zweiphasenmeßtechnik ist der Zugang zu solchen Strömungsparametern zu verbessern, die den Impuls-, Energie- und Massenaustausch zwischen den Phasen und Komponenten charakterisieren.

Die Arbeiten zur Materialsicherheit widmen sich dem Verhalten von Werkstoffen unter Neutronen- und Gammabestahlung. Mit Hilfe bruchmechanischer Untersuchungen an bestrahlten und thermisch ausgeheilten Proben sind die Versprödungssuszeptibilität und die Beständigkeit der Ausheilung in Abhängigkeit von der Materialzusammensetzung zu bestimmen. Die mikrostrukturellen Mechanismen der Bestrahlungsversprödung sollen durch hochauflösende Strukturanalysemethoden aufgeklärt werden. Um die für solche Versprödungsuntersuchungen benötigten Angaben zu den Strahlungsfluenzen zuverlässig bestimmen zu können, werden hochgenaue Methoden der Strahlungsfeldberechnung entwickelt und am Experiment validiert. Ausgehend von den Störfalllasten (Drücke, Temperaturen) und den bruchmechanischen Eigen-

schaften der sicherheitsrelevanten Komponenten ist die Integrität der Anlagen über strukturdynamische Berechnungen zu bewerten. Dabei müssen die thermischen und mechanischen Wechselwirkungen zwischen den Fluiden und den Komponenten berücksichtigt werden.

Neuere Initiativen des Institutes sind bei der Modellierung des Schadstofftransports in der Hydro- und Geosphäre angesiedelt. Besonderes Gewicht liegt dabei auf der Entwicklung von Rechenprogrammen zur Simulation der physikalischen und chemischen Vorgänge beim Transport von Schadstoffen in mit Wasser unvollständig gesättigten Bodenzonen.

Auf dem Gebiet der Kerntechnik hat das Institut gemeinsam mit der TU Dresden und der HTWS Zittau/Görlitz im regionalen Verbund dafür Sorge zu tragen, daß die wissenschaftliche und ingenieurtechnische Kompetenz auf dem Nuklearsektor in Deutschland erhalten bleibt. Dazu bedarf es einer engen Verbindung mit den auf diesem Gebiet arbeitenden Einrichtungen der Helmholtz-Gesellschaft.

## Wichtigste Ergebnisse

Für die Messung lokaler Dampf- und Gasgehalte ist ein Gittersensor entwickelt worden, der es gestattet, transiente Blasenverteilungen in Zweiphasenströmungen mit hoher Bildfolge zu messen. Ein Prototyp eines solchen Sensors liefert bei 256 Bildpunkten über dem Querschnitt einer Rohrleitung eine Bildfolgefrequenz von ca. 1 kHz. Der Sensor ist u. a. eingesetzt worden, um Zweiphasenphänomene zu untersuchen, die bei Druckschlägen in Rohrleitungen auftreten. Dies ist eine Thematik, an der die verfahrenstechnische Industrie interessiert ist.

Gleiches gilt für die Unterdrückung der Schaumbildung in Chlor-Alkali-Membranelektrolysezellen. Der Auftraggeber, die Firma UHDE, hat gemeinsam mit dem FZR ein Verfahren patentiert, das die Entstehung von stabilen Schaumzonen verhindert und damit sowohl zur Sicherheitserhöhung der Elektrolyseaktion (Vermeidung von Membranrissen) als auch zur Steigerung des Wirkungsgrades beiträgt.

Im Juli 1997 wurde ein großes EU-Forschungsvorhaben zur Validierung gekoppelter neutronenkinetischer/thermohydraulischer Störfall-Simulationsprogramme begonnen. Geeignete Ereignissequenzen aus osteuropäischen Kernreaktoren werden dokumentiert und u.a. mit dem Rossendorfer Programmpaket nachgerechnet. Das Institut führt ein Forschungskonsortium aus britischen, finnischen und deutschen Forschungseinrichtungen sowie einer Vielzahl osteuropäischer Partner an. Die Arbeiten zur Neutronenkinetik sind mit dem Forschungspreis des FZR ausgezeichnet worden.

Das neu aufgebaute Labor zur Prüfung bestrahlter Materialproben ist erfolgreich erprobt worden. Nach der Genehmigung durch das Sächsische Umweltministerium, die im 1. Quartal 1998 erwartet wird, können die über 1000 vorrätigen aktivierten Materialproben geprüft werden. Durch Analyse der bestrahlungsinduzierten mikrostrukturellen Gefügeveränderungen in Druckbehälterstählen konnte erstmals mit Hilfe von Neutronen- und Röntgenkleinwinkelstreuung nicht nur die Erhöhung der Anzahl feindisperser Ausscheidungen oder Defektcluster sondern auch die bestrahlungsbedingte Erhöhung der Konzentration atomarer Fehlstellen nachgewiesen werden.

Mit der Berechnung der Neutronenfluenzen in russischen VVER-1000 Reaktoren unter Nutzung der Monte-Carlo-Simulation konnte nachgewiesen werden, daß diese Methode geeignet ist, die Neutronenbelastung in praktisch vertretbaren Rechenzeiten hochgenau zu bestimmen. Die berechneten Werte stimmen ausgezeichnet mit gemessenen Aktivierungen an der Außenwand des russischen Reaktor-druckbehälters in Balakovo überein. Gerade wegen des Erfolges dieser Arbeiten, der internationalen Anerkennung und der Unikalität in Deutschland muß der hier 1998 anstehende Generationswechsel im Personalbereich abgesichert werden.

Die Untersuchungen zur elektromagnetischen Umströmungskontrolle haben 1997 einen weiteren Aufschwung erfahren. Es konnte experimentell demonstriert werden, daß die Salzwasserumströmung eines Körpers durch geeignete Anbringung von Permanentmagneten und Elektroden an der Oberfläche so beeinflusst werden kann, daß die Ablösung von Wirbeln verhindert und dadurch der Strömungswiderstand reduziert werden kann. Das Vorhaben ist Bestandteil eines Innovationskollegs der DFG.

### Zentrumsübergreifende Zusammenarbeit

Seit 1996 verfolgen die Institute für Radiochemie und Sicherheitsforschung ein gemeinsames Vorhaben zur Modellierung der Migration von natürlichen Radionukliden in Bergbauhalden. Das Institut für Sicherheitsforschung hat ein eigenes Programm zur Berechnung des Wassertransportes in ungesättigten Zonen entwickelt und erste nichtlineare Modelle für die chemischen Reaktionen eingebaut.

Es kommt jetzt darauf an, geeignete Daten von Haldenbeprobungen oder Kolonnenexperimenten für die Validierung des Programms verfügbar zu machen.

Seit kurzem gibt es eine Kooperation mit dem Institut für Kern- und Hadronenphysik zur Berechnung der Quellstärke einer Photoneutronenquelle an ELBE. Schwerpunkt ist die Modellierung der Gamma-Neutronen-Reaktionen für verschiedene Targetmaterialien. Die bereits früher begonnene Kooperation mit dem Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie zur technischen Nutzung von PET wird fortgeführt.

### Zusammenarbeit mit externen Partnern

Die Arbeiten zur Mikrostrukturuntersuchung strahlungs- und verformungsgeschädigter Werkstoffe mit Kleinwinkelstreuverfahren hängen in besonderer Weise von stabilen Kooperationen ab. Die Analysen zur Größenverteilung der strahlungsinduzierten Gefügausscheidungen sind an einem Strahlrohr des Forschungsreaktors FRJ-2 in Jülich durchgeführt worden.

Seit 1996 wird auch die MICROFOCUS-Beamline der ESRF Grenoble genutzt, um die verformungsinduzierten Gefügeveränderungen vor der Spitze eines Risses im Gefüge aufzudecken.

Die Zusammenarbeit mit dem FZ Jülich zu passiven Komponenten fortgeschrittener Siedewasserreaktoren wird fortgeführt. Rossendorf unterstützt die Jülicher Experimente zum Notkondensator (NOKO) durch Meßtechnik und theoretische Analysen der Konvektionsströmungen im Flutbecken des NOKO. Diese Kooperation hat dazu geführt, daß das Institut seit Anfang 1997 an einer konzertierten Forschungsaktion der EU beteiligt ist.

Das Institut führt ein gesamteuropäisches Forschungskonsortium, bestehend aus britischen, finnischen, deutschen und osteuropäischen Partnern an, das sich mit der Validierung von reaktordynamischen Programmen anhand experimenteller Daten aus Leistungsreaktoren befaßt.

Die Zusammenarbeit mit der Industrie konnte weiter ausgebaut werden. 1997 kamen 10% der Mittel des Institutes aus Forschungsaufträgen der Industrie. Zu nennen sind insbesondere Aufträge der Fa. Wacker Siltronik und der ABB Reaktor GmbH. Die Kooperation mit dem Arzneimittelwerk Dresden wurde fortgeführt. Ein Vertrag hierzu ist in Vorbereitung.

### Forschungs- und Entwicklungsvorhaben

- Anlagenmodelle für die Störfallanalyse
- Einzelphänomene in Zweiphasenströmungen
- Materialsicherheit
- Mechanisches Verhalten von LWR-Komponenten unter Störfallbedingungen
- Simulation von Teilchen- und Strahlungsfeldern
- Anlagen- und Prozeßüberwachung
- Angewandte Entscheidungsanalyse
- Flüssigmetall-Magnetohydrodynamik (MHD)

### Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]											
Gesamt			51			Wissenschaftler			17		
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]											
Postdoc	3	2,9	Doktoranden	7	4,3	Gastwissenschaftler	13	1,4	Hilfskräfte	8	3,4
Drittmittelfinanziertes Personal [Anzahl   Personenjahre]											
Wissenschaftler	37	29,5	Technisches Personal	4	4,0	Gastwissenschaftler	62	3,3	Doktoranden	4	3,9
Studentische Hilfskr.	3	1,4	Forschungs-ABM	3	0,8						
Geräteinvestitionen [TDM]											
grundfinanziert			2.049,7			drittmittelfinanziert			397,4		
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]											
Publikationen			55			Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster			47		
Seminare/Kolloquien			29			Meetings/Workshops			8		
Reports			20			Doktorarbeiten			2		
Patentanmeldungen			9								

Direktor:

Prof. Dr. F.-P. Weiß Tel.: (0351) 260-3480

e-Mail: F.P.Weiss@fz-rossendorf.de

Abteilungsleiter

Abteilung

Tel.

e-Mail

Dr. H.-M. Prasser

Störfallanalyse

3460

H.M.Prasser@fz-rossendorf.de

Dr. J. Böhmert

Neutronenversprödung

3186

J.Boehmert@fz-rossendorf.de

Dr. K. Noack

Teilchen- und Strahlungstransport

3239

K.Noack@fz-rossendorf.de

Prof. Dr. F.-P. Weiß

Mechanische Integrität

3480

F.P.Weiss@fz-rossendorf.de

Dr. G. Gerbeth

Magnetohydrodynamik

3484

G.Gerbeth@fz-rossendorf.de

# ZENTRALABTEILUNG FORSCHUNGS- UND INFORMATIONSTECHNIK

## Überblick über die Zielstellung

Die ingenieurtechnische Unterstützung der Forschungsvorhaben im FZR bei der Schaffung spezieller Experimentausrüstungen ist die Aufgabe der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik. Die Bearbeitung dieser Aufgaben erfolgt in drei Entwicklungsabteilungen mit umfangreichen Erfahrungen auf folgenden Gebieten:

- Meßtechnik (sensornahe Hardware, Meßmethodik)
- Informationstechnik (Instrumentierungssysteme, Rechentechnik, Softwareentwicklung)
- Mechanische Entwicklung (Konstruktion, Projektierung)

Daneben gibt es eine Gruppe für mechanische Technologie mit einer leistungsstarken Versuchswerkstatt, die über ein breites Spektrum verschiedenster Sondertechnologien verfügt, um den spezifischen Anforderungen seitens der wissenschaftlichen Experimente zu entsprechen.

Schwerpunkte bildeten im Jahre 1997 die Arbeiten zur Rossendorfer Beamline ROBL, die an der ESRF in Grenoble errichtet wird, Arbeiten für das Materialprüflabor, Entwicklungsarbeiten für den Tandembeschleuniger und die Arbeiten am ELBE-Projekt. An diesen Projekten sind jeweils mehrere Institute bzw. Zentralabteilungen des Forschungszentrums beteiligt.

Bedingt durch das ingenieurtechnische Profil der Zentralabteilung und ihre engen Kontakte zur Industrie fungiert sie in vielen Fällen als Bindeglied zur Überführung von originären Lösungen aus der Forschungstechnik in die Industrie (Geräte, Methoden, Technologien).

## Wichtigste Ergebnisse

### Strahlungsquelle - ELBE

Die Ergebnisse und Beiträge zum Großprojekt „Strahlungsquelle ELBE“, das durch den Leiter der Zentralabteilung als Projektleiter geführt wird, sind auf Seite 90 ff. zusammengefaßt.

### Beamline ROBL

Im Jahre 1997 erfolgte der Aufbau der Beamline und die Inbetriebnahme der Optikkomponenten. Von Seiten der Elektronik und des Kontrollsystems wurden die Verkabelung konzipiert, der Aufbau und die Inbetriebnahme der Elektronikkomponenten und der Rechentechnik, sowie die Entwicklung und Implementierung der Software für das Vakuumsystem und die Optik ausgeführt. Dabei wurden Software der ESRF installiert und konfiguriert (Vakuumsystem, Beam-Position-Monitore) und eigene Software (Slitsysteme, Spiegel, Monochrometer) entwickelt und getestet. Die Systeme sind arbeitsfähig, bedürfen aber noch der weiteren Bearbeitung (Ergänzungen, Änderungen).

Neben diesen Schwerpunktarbeiten sind die Zuarbeiten zur Goniometersteuerung und zur Datenerfassung und Signalisation der lufttechnischen Anlage zu nennen.

Für die Glovebox im radiochemischen Labor wurde eine Konzeption für die Hand- und Fernsteuerung der Präzisionsantriebe (16 Achsen) und der Hauptantriebe (3 Achsen) erarbeitet und teilweise erprobt. Für den Aufbau der Box und der Meßeinrichtungen fand die Materialbeschaffung statt. Im 2. Halbjahr erfolgte die Montage der kompletten Box einschließlich der speziellen An- und Einbauten.

### EUROBALL

Für den Aufbau des EUROBALL-Detektors in Legnaro wurden insgesamt 18 Module (VXI-Module zur Instrumentierung der BGO-Kristalle der Clusterdetektoren) geliefert. Es wurden die Inbetriebnahme, der Test und das optimale Einstellen der Module zur Erreichung einer guten Effektivität bei niedrigen Energien unterstützt. Zur Erhöhung der Effektivität bei niedrigen Energien wurden im Laufe des Jahres weitere Untersuchungen durchgeführt und als Ergebnis eine geringfügige Modifikation der Module vorgeschlagen.

### Materialprüflabor / Werkstoffprüflabor

Die Bedienpulte sowie die Probertemperier- und -positioniereinheit wurden übergeben. Ein besonderer Schwerpunkt war dabei die Ent-

wicklung der Proben temperaturregelung im Bereich von -150 bis +600 °C. Die Erprobung der Einrichtungen der 1. Ausbaustufe wurde betreut. Bei Bedarf erfolgten Änderungen an den Baugruppen des Containments. Die Gesamtdokumentation wurde überarbeitet.

Für die 2. Ausbaustufe wurde an der Grundkonzeption mitgearbeitet. Schwerpunkte bildeten außerdem die Erstellung der Unterlagen für die Aufstellung des Pendels PSD15/50 und die Fertigungsvergabe der Einhausungsbox.

An der Auswahl und Beschaffung einer Draht-erodiermaschine für die Probenherstellung wurde wesentlich mitgewirkt.

#### **PET - Zentrum**

1997 wurde das PET-Zentrum eingeweiht. Von der Zentralabteilung wurde das Aktivitätstransportsystem erprobt und übergeben. Es konnten inzwischen über 400 Aktivitätstransporte zwischen dem Zyklotrongebäude und dem PET-Labor (500 m Entfernung) erfolgreich durchgeführt werden. Die Prozeßsteuerung und -visualisierung der Methyl-Jodid-Anlage wurde erarbeitet.

**Strahlführungssystem am Tandemgenerator**  
Für die neue Strahlführung und das neue Magnetsystem wurden die Steuerung der Sputterquelle, des Duoplasmatrons und der Strahlführung überarbeitet bzw. vollständig neu aufgebaut.

Der Injektor ist jetzt wahlweise über die Pultsteuerung oder durch einen PC mit dem neuen Visualisierungssystem WIN-CC bedienbar. Diese Arbeiten sind Grundlage für den praktischen Teil einer Promotionsarbeit. Die Entwurfsarbeiten für das Vakuumsystem der Strahlführung wurden im 1. Quartal abgeschlossen. Auf Basis des Entwurfs erfolgte die umfangreiche Beschaffung der Vakuumpkomponenten. Die Konstruktion der Vakuumpkammern, Rohrleitungen usw. konnte 1997 nicht ganz abgeschlossen werden, da durch bauliche Abweichungen am Aufstellort konstruktive Änderungen notwendig wurden. Mit der Fertigung einer Musterkammer und anderer Baugruppen konnte begonnen werden.

#### **Dresdener Hochfeldlabor**

Für das Dresdener Hochfeldlabor, das 1998 vorgeschlagen wird, wurden Vergleichsuntersuchungen zur Energieversorgung durchgeführt und ein Vorschlag ausgearbeitet.

#### **Entwicklung von Spezialgeräten**

- Für ANKE (0°- Facility) wurde eine mit dem Schaltkreis RAL 118 bestückte Leiterplatte erfolgreich getestet, so daß deren Fertigung im September in Jülich beschlossen wurde.
- Der „Impulswirbelstrom-Rißprüfmolch für Pipelines“ wurde mit Abschlusdokumentation an den Auftraggeber Pipetronix GmbH Karlsruhe übergeben.
- Der MMCA 166 (Miniatur Multichannel Analyser) wurde im Rahmen eines BMBF-Projekts entwickelt und in die Serienproduktion überführt.
- Die Einrichtung zur Strommessung am Helitron in Darmstadt wurde entwickelt und aufgebaut.

#### **Werkstattarbeiten**

##### **Beamline ROBL**

- Aufbau Glovebox mit optischer Bank und Hubeinrichtung
- Herstellung aller nichtkäuflichen Einrichtungen für Glovebox, wie z. B. Probenwechsler, Probenhalter, Blendensystem und Positioniersysteme
- Herstellung von unterschiedlichen, nichtkäuflichen Einzelkomponenten, welche für den Aufbau der Beamline benötigt wurden

##### **Institut für Sicherheitsforschung**

- Herstellung von verschiedenen Ausführungen des Gittersensors für Strömungsmessungen
- Herstellung von Sonden
- Unterstützung bei Arbeiten für das Werkstoffprüflabor

##### **Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung**

- Herstellung von Einbauten für die Implantationskammer TANDETRON
- Beginn der Herstellung von Komponenten für Strahlkopplung
- Herstellung von Elektrodenfrontplatten mit Kühlung
- Herstellung von Einzelteilen für Cluster-System

##### **Institut für Kern- und Hadronenphysik**

- Herstellung von Einzelteilen und Geräten für den EUROBALL-Detektor

##### **Ohne Zuordnung**

- Bearbeitung von 77 Aufträgen kleineren bis mittleren Umfangs, die keinen der oben genannten Themen zugeordnet sind.

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]			
Gesamt	52		Wissenschaftler 11
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]			
Doktoranden	1	1,0	
Geräteinvestitionen [TDM]			
grundfinanziert	433,6		drittmittelfinanziert 0
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]			
Publikationen	9		Vorträge 12

Abteilungsleiter

Dr. F. Gabriel

Tel. : (0351) 260-3109

e-Mail: F.Gabriel@fz-rossendorf.de



# ZENTRALABTEILUNG ANALYTIK

## Überblick über die Zielstellung

Die Zentralabteilung Analytik als Teil der wissenschaftlichen Infrastruktur führte für die Institute des FZR zahlreiche verschiedenartige Untersuchungen mit chemischen und festkörperphysikalischen Methoden durch. Die Lösung der Aufgaben erfolgt in enger Wechselwirkung mit den Themenbearbeitern. Aus den gesetzlichen Erfordernissen des Umweltschutzes am Standort Rossendorf ergab sich ein weiterer Teil der Aufgaben der Abteilung. Darüber hinaus wurden auch Leistungen für Anwender außerhalb des FZR erbracht.

Im wesentlichen durch personelle Probleme bedingt, wurde die Zentralabteilung Analytik zum Jahresende 1997 aufgelöst. Die beiden verbliebenen Mitarbeiterinnen der Strukturanalytik setzen ihre Arbeiten im Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung bzw. im Institut für Sicherheitsforschung fort. Die anderen Beschäftigten bilden im Institut für Radiochemie die neue Abteilung Analytik.

## Wichtigste Ergebnisse

Schwerpunkt der Elementanalytik (ICP-Massenspektrometrie und Atomabsorptionsspektrometrie) waren Untersuchungen für das Institut für Radiochemie an einer großen Zahl unterschiedlichster Proben. Beim Nachweis des für das Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie wichtigen Elementes Technetium-99 mit ICP-MS konnte eine untere Grenze von 0.05 ng/g in wäßrigen Lösungen erreicht werden. Die Überprüfung der Freisetzung von Selen aus organischen Proben (Serum und Urin) wurde noch nicht abgeschlossen, da an-

deren Arbeiten eine höhere Priorität eingeräumt werden mußte und Urin vorerst nicht mehr zu den von uns zu untersuchenden Materialien gehört. Arbeiten zur Ermittlung der Abhängigkeit der Impulsrate des internen Standards von der Lösungsmatrix bei ICP-MS zeigten, daß sich keine einfachen allgemeinen Schlußfolgerungen ableiten lassen, da die möglichen Bestandteile der Matrix sehr komplex wirken.

In der Komponentenanalytik standen zahlreiche TOC - Bestimmungen, insbesondere für das Institut für Radiochemie, im Vordergrund. Ein Verfahren zur Spurenbestimmung von Fluor bis hinab zu 5 ng/g in kleinen Wasserproben durch Ionenchromatographie wurde für das Institut für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie zur Charakterisierung von O-18 - angereichertem Wasser erarbeitet.

In der Strukturanalytik wurden die Untersuchungen an zahlreichen Proben implantierter Werkstoffe (Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung) und von Reaktordruckbehälterstählen (Institut für Sicherheitsforschung) fortgeführt. Ein neues Aufgabengebiet waren umfangreiche EDX-Analysen von Gesteinsproben des Institutes für Radiochemie zu deren mineralogischer Charakterisierung. Untersuchungen zu Höhengmessungen im µm-Bereich am Rasterelektronenmikroskop mittels der Fokussierung zeigten, daß bei solchen Bestimmungen die erforderliche Genauigkeit nicht erreicht wird.

Alle drei Arbeitsgruppen nahmen erfolgreich an Ringversuchen zur Qualitätskontrolle im nationalen Rahmen teil.

## Zusammenarbeit mit externen Partnern

außerhalb: VKTA Rossendorf; TU Dresden

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]			
Gesamt	11	Wissenschaftler	4
Geräteinvestitionen [TDM]			
grundfinanziert	63,2		
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]			
Meetings/Workshops	1		

Abteilungsleiter

Dr. K. Krogner

Tel.: (0351) 260-3133

e-Mail: K.Krogner@fz-rossendorf.de

# ZENTRALABTEILUNG NEUE BESCHLEUNIGER

## Überblick und Zielstellung

Die Zentralabteilung Neue Beschleuniger hat als Teil der wissenschaftlichen Infrastruktur die Aufgabe, Projektierungs- und Entwicklungsarbeiten für das Projekt der ELBE-Strahlungsquelle durchzuführen sowie das Zyklotron U-120 für interne und externe Nutzer zu betreiben und zu warten.

Für das ELBE-Projekt erstrecken sich die Arbeiten der Zentralabteilung schwerpunktmäßig auf:

- Entwicklung der cw-Quelle
- HF-Technik
- Strahlenschutz

## Wichtigste Ergebnisse

### Strahlungsquelle ELBE (s. a. S. 90 ff.)

Für die Elektronenquellen-Versuchsanlage wurde die Bunchlängen-Meßeinrichtung, die aus einem Dipol-Magneten und einer Kicker-Kavität besteht, in den betriebsmäßigen Zustand überführt. Mit dieser Einrichtung konnte dann die Bunchlänge der cw-Quelle zu 8 ps (Halbwertsbreite) in guter Übereinstimmung mit dem vorher berechneten Wert gemessen werden.

Die Stromregelung für die Kathodenheizung wurde durch Einfügen einer elektronischen Strombegrenzung verbessert. Danach wurden unter der Randbedingung der Einhaltung nur erlaubter Dosisleistungswerte im Versuchsraum (Strahlenschutz) zwei extreme Betriebsregime für die cw-Quelle erprobt und sehr gute Ergebnisse erzielt:

- hoher Strom: 100 keV, 400  $\mu$ A
- kleine Emittanz (maximale Betriebsspannung): 360 keV, 120  $\mu$ A,  $\epsilon_n = 0,2 \pi$  mm mrad

Im Rahmen der Kooperation mit dem Budker-Institut wurde in Novosibirsk die Fertigung des supraleitenden Resonators für die Entwicklung einer lasergepulsten HF-Elektronenquelle abgeschlossen. Die Warm-Erprobung des Tuningsystems und des HF-Filters verliefen erfolgreich. Die Resonator-Komponenten sind nach Rossendorf überführt worden. Die Konstruktion der Photokathoden-Präparations-

kammer wurde in Novosibirsk fertiggestellt und dort in die Produktionsphase überführt.

Die Arbeiten zum ELBE-Hochfrequenzsystem konzentrierten sich auf die Konstruktion von Leistungsverstärkern mit Vorverstärkern und Stabilisierungsschaltungen für normaleitende und supraleitende Beschleunigerstrukturen. Einzelne Komponenten des modular gehaltenen Systems wurden an der Elektronenquellen-Versuchsanlage meßtechnisch optimiert und getestet.

Der Sicherheitsbericht für die Strahlungsquelle ELBE wurde fertiggestellt und mit Stand 15. 05. 1997 der zuständigen Behörde mit dem Antrag auf Errichtungsgenehmigung nach § 15 der Strahlenschutzverordnung (StrlSchV) übergeben. Die Erteilung der Errichtungsgenehmigung wurde im Mai 1998 erteilt.

### Zyklotron U-120

Das Zyklotron lief im Berichtszeitraum ohne nennenswerte Störung.

Hauptanwendungen waren:

- Herstellen von  $^{211}\text{At}$  für die medizinische Forschung (FZR/Institut für Radiochemie; TU Dresden; Universität Göteborg)
- (n,f)-Reaktionen für Modellexperimente mit dem Gas-Jet zur Chemie der schwersten Elemente (FZR/Institut für Radiochemie; TU Dresden)
- Nuklidherstellung für Modellexperimente mit Molybdän- und Wolfram-Isotopen zur chemischen Charakterisierung des Elementes 106 (FZR/Institut für Radiochemie; internationale Kollaboration)
- Aktivierungen zur Untersuchung von Gitterfehlbesetzungen in ternären Halbleitermaterialien (TU BA Freiberg)
- Dünnschichtaktivierungen für Verschleißuntersuchungen (überregionale Auftraggeber)
- Tests an Detektorkomponenten mit dem Zyklotronstrahl (DESY, Institut für Hochenergiephysik Zeuthen)

## Zusammenarbeit mit externen Partnern

Die im Rahmen des ELBE-Projektes durchzuführenden Arbeiten laufen unter ständiger Zusammenarbeit mit den Institutionen Stanford FEL Center, DESY Hamburg, TH Darmstadt und Budker-Institut Novosibirsk. Inhalt der

Zusammenarbeit sind der wissenschaftliche Informationsaustausch und die gemeinsame Bearbeitung von Teilaufgaben.

In den neuen Bundesländern ist die Zyklotrontechnik nur in Rossendorf angesiedelt. Der Zyklotronstrahl wird daher neben Forschern aus dem FZR auch von regionalen und über-

regionalen Forschergruppen in Anspruch genommen. Traditionell sind die Herstellung radioaktiver Nuklide für biomedizinische und radiochemische Forschungsarbeiten universitärer Einrichtungen sowie Dünnschichtaktivierungen für Verschleißuntersuchungen industrienahe Forschungsinstitute.

### Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]									
Gesamt		10			Wissenschaftler			3	
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]									
Postdoc		Doktoranden		1	1,0	Gastwissenschaftler		Hilfskräfte	
								1	0,1
Drittmittelfinanziertes Personal [Anzahl   Personenjahre]									
Gastwissenschaftler		6	0,4						
Geräteinvestitionen [TDM]									
grundfinanziert		31,3			drittmittelfinanziert				
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]									
Publikationen		2			Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster			3	
Seminare/Kolloquien		1			Meetings/Workshops			1	

Abteilungsleiter

Dr. H. Guratzsch

Tel.: (0351) 260-3283

e-mail: H.Guratzsch@fz-rossendorf.de

# ABTEILUNG KOMMUNIKATION UND DATENVERARBEITUNG

## Überblick über die Zielstellung

Als Bestandteil der wissenschaftlich-technischen Infrastruktur ist die Abteilung Kommunikation und Datenverarbeitung für Planung, Koordinierung und Betrieb der Informatik-Infrastruktur am Forschungsstandort Rossendorf zuständig. Zu ihren Aufgaben gehören der Betrieb der Zentralen Server, die Bereitstellung infrastruktureller Dienste, der Benutzerservice auf den Gebieten Numerik, Computer-Algebra, Programmierung, Visualisierung und Textsysteme sowie die Koordinierung und Beschaffung von PC-Software für den Forschungsstandort. Hinzu kommen Ausbau, Leistungserhöhung und Betreuung des Daten-netzes am Forschungsstandort einschließlich dessen Anbindung an das Wissenschaftsnetz (WIN).

Zur Beratung der Abteilung nahm im Herbst 1997 die Kommission für Datenverarbeitung im Auftrage des Wissenschaftlich-Technischen Rates ihre Tätigkeit auf.

## Wichtigste Ergebnisse

Mit der Inbetriebnahme des Rechners SPP 2000 der Fa. HP (8 Prozessoren PA 8000 und Shared-Memory-Architektur) folgte ein weiterer Schritt zum Ausbau der Compute-Server bei einem Zuwachs an Rechenleistung von 1300 MFLOPS (LINPACK). Infrastrukturelle Dienste wurden zur Entlastung und geplanten Ablösung der CONVEX C3220 auf kleinere, dedizierte Server verlagert und teilweise neu organisiert (z. B. der Mail-Dienst). Die Abteilung verfügt über insgesamt 11 Zentrale Server.

An den Zentralen Servern waren Ende 1997 insgesamt 745 Nutzer registriert. 65 Betreiber dezentraler PC nutzten Speicherplatz der Zentralen Server als Netzlaufwerke.

Die Graphikdienste wurden quantitativ und qualitativ weiterentwickelt. Seit 1997 bearbeitet und druckt die Abteilung farbige Poster im Format A0. 1997 wurden 30.000 Farbdrucke und 200 farbige Poster hergestellt sowie 200 Bilder gescannt.

Die Darstellungsmöglichkeiten von Videos wurden um die Technik der bewegten Kamera erweitert. Es entstanden 4 Videos.

Das lokale Netz am Standort wurde ausgebaut und modernisiert. Ende 1997 waren 1050 IP-Adressen aktiv. Neben der Domain fz-rossendorf.de wurden die Domains vkta-rossendorf.de und nuklearmedizin.de eingerichtet. ISDN wird zur Anbindung räumlich entfernter Labors auch im Stadtbereich genutzt. Für die Einwahl in das Datennetz steht mit der Installation von MAX1800 (ASCEND) das leistungsfähige Protokoll ppp zur Verfügung. Als innovative Netztechnologie wurde Fast Ethernet erschlossen und für den Einsatz am Standort vorbereitet. Die notwendigen Schritte für die Durchsatzerhöhung des WIN-Anschlusses auf 2 MBit/s waren Ende 1997 eingeleitet.

Der Benutzerservice unterstützte die Nutzer zentraler wie dezentraler Rechentechnik auf den Gebieten Numerik, Programmierung, Visualisierung, Textverarbeitung und Systemnutzung. Er erschloß ca. 20 neue Software-Produkte und machte in Seminaren die Nutzer mit deren Anwendung bekannt. Zentrale Aufgabe war auch 1997 die Unterstützung des parallelen Rechnens durch Programmanalysen, Nutzerberatungen und Hilfe bei der Parallelisierung von Programmen.

Die Installation eines neuen WWW-Servers mit der Funktionalität „virtuelle Server“ ermöglichte die Einrichtung von WWW-Servern für alle drei genannten Domains.

Der Dienst WinDD-NT-Server zur zentrumsweiten Bereitstellung ausgewählter Windows-Anwendungen für Nutzer an Tektronix X-Terminals wurde erweitert. 62 Nutzer nahmen dieses Dienstangebot an.

Für die dezentrale PC-Technik beschaffte der Benutzerservice im Berichtszeitraum 713 Software-Produkte im Wert von insgesamt 820 TDM. Mitarbeiter der Abteilung waren in Projekte der Institute einbezogen oder lösten spezielle Programmieraufgaben. Die Abteilung beteiligte sich außerdem an dem EU-Projekt „Cooperative Network Matching EU and FSU Activities in the Field of Nuclear Fission Safety“.

## Zusammenarbeit mit externen Partnern

Die Abteilung arbeitete sehr eng insbesondere mit der TU Dresden zusammen. Das betraf vor allem die Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften (wissenschaftliches Rechnen, Physik) sowie die Fakultät Informatik (Rechnersysteme, Datennetze) und die Me-

dizinische Fakultät (Nuklearmedizin, Multimedia). Darüber hinaus gab es wesentliche Kooperationen mit folgenden Einrichtungen: DFN-Verein, DIGI, KODA der HGF, EDV-Arbeitskreis der WGL, AG Graphische Datenverarbeitung der HGF, AVS-Competence Center Ulm, CONVEX-User-Group Germany/Europe, NAG-User-Association Oxford/Großbritannien und VIK Dubna/Rußland.

## Statistischer Überblick

Mitarbeiter [Planstellen]										
Gesamt	15				Wissenschaftler			5		
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]										
Postdoc		Doktoranden	1	1,0	Gastwissenschaftler	6	0,2	Hilfskräfte	1	0,1
Geräteinvestitionen [TDM]										
grundfinanziert	298,3				drittmittelfinanziert					
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]										
Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster	2				Seminare/Kolloquien			3		
Reports	1									

Abteilungsleiter

Dr. R. Fülle

Tel.: (0351) 260-3264

e-Mail: R.Fuelle@fz-rossendorf.de

# PROJEKTGRUPPE ESRF-BEAM-LINE

## Überblick über die Zielstellung

Die Projektgruppe errichtet an der Europäischen Synchrotronstrahlungsquelle (ESRF) in Grenoble ein Strahlrohr am Ablenkmagneten BM20 – die Rossendorfer Beam-Line (ROBL). Die beiden alternativen Meßplätze für

- radiochemische Untersuchungen mit Röntgenabsorptionsspektroskopie und
- materialwissenschaftliche Untersuchungen mit Diffraktion und Reflektometrie

werden vorwiegend vom FZR genutzt. Sie stehen aber auch für Kooperationspartner offen.

## Wichtigste Ergebnisse

Im 1. Quartal wurden die Bau- und Installationsarbeiten der Meßhütten und Kontrollkabinen abgeschlossen. Das Sonderlüftungssystem sowie die Überwachung der Abluft für die Radiochemiehütte wurden in Betrieb genommen.

Im 2. Quartal wurde das von der Industrie gefertigte Optik- und Vakuumsystem aufgebaut. Das Steuerungs- und Kontrollsystem dieser Komponenten sowie Teile des Sicherheitssystems für den Dauerbetrieb wurden parallel zum mechanischen Aufbau installiert und in Betrieb gesetzt. Die Konzeption und Entwicklung letzterer Systeme erfolgte im FZR unter Verwendung von ESRF-Standardlösungen (Hard- und Software).

Am 26.6.1997 wurde erstmals ein Synchrotronstrahl in die Röntgenoptik von ROBL gebracht. Alle Systeme funktionierten ohne Probleme. Ende September war der Strahl über alle optischen Komponenten bis zum letzten Meßplatz gefädelt. Der Monochromator erfüllt noch nicht alle Spezifikationen, so daß der Hersteller Nachbesserungen vornehmen muß.

Das Goniometer als Grundgerät für den Materialforschungsmeßplatz wurde in der ersten Jahreshälfte im FZR getestet, die Steuerelektronik entwickelt und eine Gruppe von Grundprogrammen für den Meßbetrieb geschrieben. Im Oktober konnte das Goniometer in Grenoble aufgebaut und mit dem ersten von drei geplanten Detektorsystemen erfolgreich in Betrieb gesetzt werden.

Das Grundgerät für den Radiochemieplatz, die Handschuhbox mit Positioniereinheiten für die Detektoren und Proben, wurde im 2. Halbjahr im FZR aufgebaut. Zum Jahresende konnte mit inaktiven Erprobungen begonnen werden. Die Installation an der ESRF kann im Frühjahr 1998 erfolgen. Ein Signalisationssystem, das alle sicherheitsrelevanten Meßwerte der Radiochemiehütte vereinigt, wurde im FZR entwickelt und die Einzelkomponenten in Grenoble weitestgehend getestet.

Zum Jahresende konnten die ersten Diffraktionsexperimente am Materialforschungsmeßplatz durchgeführt werden. Die mit Siliziumpulver gemessene Auflösung für die Röntgendiffraktion  $\Delta d/d$  ist bei 8 keV für alle d-Werte besser als  $10^{-3}$ , d.h. mehr als 1 Größenordnung besser als bei Laborröntgenanlagen. Die Linienbreite der Diffraktionspeaks wird damit nur durch die Probeneigenschaften bestimmt, der Gerätebeitrag ist vernachlässigbar. Die gemessenen Streuintensitäten sind noch unter den Zielwerten. Noch zu installierende Optimierungsmöglichkeiten für die Röntgenoptik werden 1998 die geplanten Parameter erreichbar machen.

## Zusammenarbeit mit externen Partnern

Hauptpartner der Projektgruppe ist die ESRF, die den Aufbau der Beamline durch Beratung, Übergabe von internen Dokumentationen, Überlassung von Software und bei der Auftragsabwicklung unterstützt. Die Nutzung der Infrastruktur der ESRF ist kostenpflichtig. Eine Zusammenarbeit mit dem VKTA auf dem Gebiet der Kontaminationskontrolle der Radiochemiehütte war sehr wesentlich für ROBL. Bei Röntgenabsorptionsmessungen von Radionukliden besteht eine intensive und mehrjährige Zusammenarbeit mit dem Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL). Im Frühjahr 1997 wurde der speziell am LBNL gebaute 4-Elemente-Ge-Fluoreszenzdetektor, der das Kernstück des radiochemischen Meßplatzes bildet, zum FZR transportiert. Er konnte bereits für Messungen an verdünnten Uran- und Technetiumsystemen des Instituts für Radiochemie bzw. des Instituts für Bioanorganische und Radiopharmazeutische Chemie eingesetzt werden.

## Statistischer Überblick

Die Projektgruppe setzt sich überwiegend aus Mitarbeitern und Nachwuchswissenschaftlern der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik, des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung sowie des Instituts für Radiochemie zusammen. Die Mitarbeiter sind in der Regel nur zu einem Teil ihrer Arbeitszeit für die Projektgruppe tätig.

Mitarbeiter am Projekt [beteiligte Mitarbeiter z. T. nur teilweise]			
Gesamt	32		Wissenschaftler 15
Annexpersonal [Anzahl   Personjahre]			
Postdoc	1		
Investitionen [DM]			
grundfinanziert	3.166,8		drittmittelfinanziert
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]			
Seminare/Kolloquien	4		Vorträge/Konferenzbeiträge/Poster 4
Meetings/Workshops	6		

Leiter: Dr. W. Matz    Tel.: (0351) 260-3122    e-Mail: W.Matz@fz-rossendorf.de

# PROJEKTGRUPPE ELBE-QUELLE

## Überblick über die Zielstellung

Die Projektgruppe verfolgt das Ziel, am Forschungsstandort Rossendorf einen supraleitenden 40 MeV Elektronenbeschleuniger mit hoher Brillanz und niedriger Emittanz (ELBE) u. a. mit einem Freie-Elektronen-Laser (FEL) für den Infrarotbereich aufzubauen. Für die Nutzung der FEL-Strahlung wird eine sogenannte User Facility eingerichtet werden, die auch externen Wissenschaftlern die Möglichkeit bieten wird, diese einzigartige Strahlungsquelle für Forschungszwecke zu nutzen. Des Weiteren wird der Elektronenstrahl für strahlungs- und kernphysikalische Untersuchungen verwendet werden; die Erzeugung von Positronen und Neutronen für Materialuntersuchungen (TU Dresden) ist geplant.

## Wichtigste Ergebnisse

Ein großer Teil der Konstruktionsunterlagen des Kryostatmoduls wurde erarbeitet. Ein Funktionsmuster des neuartigen Tuners zur Längenänderung (Frequenzabstimmung) der supraleitenden Cavities im Nanometerbereich wurde gefertigt und als Einzelgruppe im Labor erprobt. Die bisherigen Tests verliefen erfolgreich. Mit der umfangreichen Fertigung von zwei weiteren Tunern für die Erprobung unter Betriebsbedingungen an der Stanford University wurde begonnen.

Im Rahmen der Zusammenarbeit mit der Stanford University wurden diverse Fertigungsunterlagen erstellt, kleine Baugruppen gefertigt und Teile beschafft, um in Stanford ein erstes Funktionsmuster aufzubauen und 1998 damit eine Teilerprobung durchzuführen.

Die Fertigung der supraleitenden Niob-Cavities bzw. Flüssig-Helium-Tanks für Stanford wurde konstruktionsseitig betreut.

Die FEL-Gun wurde entworfen und konstruiert. Die Fertigung des Funktionsmusters hat begonnen. Für den Umbau des Gun-Versuchsstandes wurde eine Lösung erarbeitet.

Für den Rein- und Montageraum konnten eine Konzeption erarbeitet und für die Projektausführung Angebote eingeholt werden.

Alle wesentlichen Vakuumkomponenten für Beschleuniger und Beamlines wurden beschafft. Das gleiche gilt für erste Einrichtungsteile des Rein- und Montageraumes.

Unterstützt durch 3 Arbeitsaufenthalte an der Stanford University wurden die Grundlagen für folgende Teilaufgaben geschaffen:

- Realisierbarkeit eines Infrarot FEL für den Wellenlängenbereich 25 bis 150  $\mu\text{m}$
- Konzeption der FEL-Gun und des ELBE-Injektors
- Strahlführung und Strahlidiagnose
- Strahltransportrechnungen

Neben einigen Arbeiten zur Ergänzung des Gun-Versuchsstandes (Bunchlängenmessung) wurden das Steuerungs- und Teile des Interlocksystems konzipiert und mit dem Aufbau der Steuerschranke begonnen.

Folgende größere Baugruppen wurden hergestellt:

- für den Versuchsstand (CW-Injektor):
  - Faraday Cup
  - Kicker - Cavity
  - Kollimator 1. und 2. Ebene
- für den Beschleunigerkryostaten:
  - Teststand TUNER 2000 mit Tuner
  - Beginn der Herstellung von 2 Stück Tuner für Erprobung in Stanford (USA)
  - Verbindungshülse verschiedene Zwischenstücke
  - Zuggurte mit Endpfosten für die Aufhängung der Cavity im Kryostat

## Zusammenarbeiten mit externen Partnern

Der schnelle Fortschritt der Entwicklung des High Tech Elektronenbeschleunigers als auch die Entwicklung des FEL für den Infrarotbereich sind ohne die umfangreiche Unterstützung externer Partner aus den verschiedensten Fachgebieten undenkbar. Aus der enormen Vielzahl der Partner können hier nur einige genannt werden:

- TH Darmstadt, Institut für Kernphysik
- DESY Tesla-Projekt



- Universität Stanford, HEPL (Kalifornien, USA)
- CEBAF (Virginia, USA)
- Universität Mainz, Institut für Kernphysik
- Universität Bonn, Physikalisches Institut
- Universität Bonn, Geodätisches Institut
- Universität Dortmund, Fachbereich Physik

### Statistischer Überblick

Die Projektgruppe setzt sich überwiegend aus Mitarbeitern und Nachwuchswissenschaftlern der Zentralabteilung Forschungs- und Informationstechnik, des Instituts für Kern- und Hadronenphysik sowie der Zentralabteilung Neue Beschleuniger zusammen. Die Mitarbeiter sind in der Regel nur zu einem Teil ihrer Arbeitszeit für die Projektgruppe tätig.

Mitarbeiter [am Projekt beteiligte Mitarbeiter; z. T. nur teilweise]			
Gesamt	28	Wissenschaftler	13
Annexpersonal [Anzahl   Personenjahre]			
Postdoc	3		
Geräteinvestitionen [TDM]			
grundfinanziert	2.319,0	drittmittelfinanziert	
Wissenschaftliche Veröffentlichungen [Anzahl]			
Publikationen/Vorträge	3		

Leiter: Dr. F. Gabriel Tel. : (0351) 260-31 09 e-Mail: F.Gabriel@fz-rossendorf.de

# ADMINISTRATIVE UND TECHNISCHE INFRASTRUKTUR

Die administrative und technische Infrastruktur des Forschungszentrums Rossendorf umfaßt die Bereiche Finanz- und Rechnungswesen, Personal- und Sozialwesen, Recht, Patente, Liegenschaften, Technische Infrastruktur, Einkauf und Materialwirtschaft, Allgemeine Dienste sowie die Projektträgerschaft Energie und Umwelt. Durch die kontinuierliche administrative, juristische und technische Begleitung der wissenschaftlichen Projekte sichern diese Abteilungen die Rahmenbedingungen für den Erfolg des Forschungsstandorts Rossendorf.

Das FZR verfügte 1997 über ein Finanzvolumen von insgesamt 98,6 Mio. DM. Neben den Mitteln aus der Grundfinanzierung (83,5 Mio. DM), die jeweils zur Hälfte durch den Bund und den Freistaat Sachsen bereitgestellt werden, konnten knapp 12 Mio. DM aus zusätzlichen Förderprojekten und Drittmittelverträgen nationaler und internationaler Einrichtungen sowie der Industrie eingeworben werden. 1,6 Mio. DM wurden aus Sondermitteln und 1,5 Mio. DM aus eigenen Einnahmen bestritten.

Der hohe Investitionsanteil (32 %) der Ausgaben belegt die Zukunftsorientiertheit des FZR. Neben der Sanierung und Modernisierung der Gebäude und der technischen Infrastruktur, die auch in diesem Jahr weiter vorangetrieben wurden, sind insbesondere bei den Investitionen der Ausbau der Ionenstrahlphysik, der Aufbau des Synchrotronmeßplatzes ROBL in Grenoble sowie die Vorarbeiten für den Aufbau der Strahlungsquelle ELBE als größte Einzelprojekte zu nennen.

Zum 31.12.1997 beschäftigte das FZR 447 Personen auf 432,5 Planstellen, die Aufwendungen für das Personal beliefen sich dabei auf 37,4 Mio. DM.

Zusätzlich konnten aus Annex- und Drittmitteln weitere 98 Mitarbeiter, 19 Postdoktoranden sowie insgesamt 67 Doktoranden beschäftigt werden, von denen im Laufe des Jahres 1997 15 ihre Promotion abschlossen. Weiterhin betreute das FZR insgesamt 28 Auszubildende in fünf Ausbildungsberufen, von denen drei ihre Ausbildung im Berichtsjahr erfolgreich beendeten.

Im Rahmen der Betreuung der Organisationseinheiten hinsichtlich der verschiedensten rechtlichen Belange konnten im Berichtszeitraum 19 wissenschaftliche Kooperations- bzw. Forschungs- und Entwicklungsverträge sowie 17 weitere, inhaltlich auf wissenschaftliche Leistungen ausgerichtete Verträge, vornehmlich Werk- und Honorarverträge und 16 Lizenzverträge abgeschlossen werden.

Das FZR verfügte Ende 1997 über 41 deutsche sowie 18 ausländische Patente bzw. Anmeldungen und ist an 13 deutschen und 5 ausländischen Erfindungen bzw. Schutzrechten beteiligt.

Die feste Einbindung des FZR in nationale und internationale Wissenschaftskooperationen wird nicht nur in den zahlreichen Projekten zu denen Rossendorfer Forscher wissenschaftliche und technische Beiträge leisten deutlich, sondern auch an der hohen Zahl von 232 Gastwissenschaftlern aus 26 Ländern, die am Forschungszentrum wissenschaftliche Arbeiten durchführten.

Zusätzliche Mittel für die Finanzierung eigener Arbeiten und solcher Kooperationen, die 1997 für die insgesamt 156 laufenden Projekte ein Finanzvolumen von 8,7 Mio. DM umfaßten, konnten dabei nicht nur aus nationalen Programmen eingeworben werden, sondern entsprangen zu einem erheblichen Teil auch internationalen Förderprogrammen, wie z. B. Programmen der Europäischen Union.

---

Impressum:

Herausgeber: Forschungszentrum Rossendorf e. V.  
Postfach 51 01 19  
01314 Dresden

Telefon: (0351) 260-0  
Telefax: (0351) 269-0461  
Telex: 328683 fzf d  
USt-IdNr.: DE140213784  
Internet: <http://www.fz-rossendorf.de>

Fotos: Fotos ohne Quellennachweis stammen  
von Mitarbeitern des FZR und dem FZR-Fotoarchiv

Gesamtherstellung: Initial Satz & Grafik Studio, Rossendorf

Als Manuscript gedruckt  
Alle Rechte beim Herausgeber