

# Wissenschaftlicher Ergebnisbericht 2007

Download-Version 2008-09-12

Maßgeblich ist die aktuelle Online-Version:  
[www.fz-juelich.de/scientific-report-2007](http://www.fz-juelich.de/scientific-report-2007)

## **Impressum**

Wissenschaftlicher Ergebnisbericht 2007  
der Forschungszentrum Jülich GmbH

veröffentlicht im Internet:

[www.fz-juelich.de/scientific-report-2007](http://www.fz-juelich.de/scientific-report-2007)

URN: urn:nbn:de:urn:nbn:de:0001-00446

(resolving URL: <http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn:nbn:de:0001-00446>)

Herausgegeben von der Stabsstelle  
Unternehmensentwicklung und Außenbeziehung (UA)  
Redaktion: Dr. Christoph Arens (UA)

Mai 2008

© Forschungszentrum Jülich GmbH

## Inhalt

Das Forschungszentrum Jülich...	4
Erläuterungen	4
<b>Programm(anteils)berichte bzw. Vorhabensberichte</b>	
Energie	
Erneuerbare Energien	5
Rationelle Energieumwandlung	9
Fusion	20
Nukleare Sicherheitsforschung	28
Erde und Umwelt	
Geosystem: Erde im Wandel	35
Atmosphäre und Klima	40
Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung	47
Nachhaltige Entwicklung und Technik	54
Eingriffe des Menschen in Biogeosysteme in sensiblen Regionen	59
Gesundheit	
Funktion und Dysfunktion des Nervensystems	62
Biotechnologie	71
Schlüsseltechnologien	
Wissenschaftliches Rechnen	78
Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen	89
Struktur der Materie	
Physik der Hadronen und Kerne	101
Kondensierte Materie	107
Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen	116
Molekulare Magnete	123
<b>Großgeräte</b>	
Nationales Höchstleistungsrechenzentrum	
John von Neumann – Institut für Computing (NIC)	125
Kühler-Synchrotron COSY	128
Neutronenquelle FRJ-2	130
<b>FE-durchführende Institute bzw. Organisationseinheiten</b>	
Institut für Festkörperforschung (IFF)	133
Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN)	135
Institut für Kernphysik (IKP)	137
Jülich Supercomputing Centre (JSC) inkl. NIC	138
Zentralinstitut für Elektronik (ZEL)	140
Institut für Energieforschung (IEF)	142
Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre (ICG)	145
Zentralabteilung Technologie (ZAT)	148
Institut für Neurowissenschaften und Biophysik (INB)	149
Institut für Biotechnologie (IBT)	152
Zentralabteilung für Chemische Analysen (ZCH)	153
Geschäftsbereich Sicherheit und Strahlenschutz (S)	154
Zentralabteilung Forschungsreaktoren (ZFR)	155
Zentralbibliothek (ZB) (z.K., kein FE)	156
<b>Tabellarische Übersichten und Downloads</b>	
	157

# Das Forschungszentrum Jülich...

ist ein internationales und interdisziplinäres Kompetenzzentrum in der Hermann von Helmholtz - Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren und arbeitet im Rahmen der [Helmholtz-Forschungsbereiche](#)

- [Energie](#)
- [Erde und Umwelt](#)
- [Gesundheit](#)
- [Schlüsseltechnologien](#)
- [Struktur der Materie](#)

Der vorliegende Wissenschaftliche Ergebnisbericht enthält durch die wissenschaftlichen Verantwortlichen angefertigte Ergebnisdarstellungen der FE-Arbeiten des Jahres 2007 in den betreffenden Helmholtz-Programmen.

## Der Wissenschaftliche Ergebnisbericht

gibt den Wissenschaftlern des Zentrums und der interessierten Öffentlichkeit eine zusammenfassende Information über die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des Zentrums.

Forschungszentrum Jülich GmbH  
Jülich, im Mai 2008

---

### Erläuterungen

Der vorliegende Bericht berichtet über die im Forschungszentrum durchgeführten FE-Vorhaben des FE-Programms 2007.

Gegliedert nach Helmholtz-Forschungsbereichen und -Programmen werden die wesentlichen Ergebnisse des Berichtsjahres präsentiert. Optional können Publikations- und - sofern vorhanden - Patentlisten sowie Detailergebnisse herunter geladen werden.

Ergänzt wird der Bericht durch Kurzbeschreibungen der FE-durchführenden Institute bzw. Organisationseinheiten. Auch hier stehen Publikations- und Patentlisten sowie gegebenenfalls Detailergebnisse zum Herunterladen bereit. Weiterhin ist ein Link zur Internet-Seite des Instituts anklickbar.

Abgeschlossen wird der Wissenschaftliche Ergebnisbericht mit einigen tabellarischen Übersichten.

Die Navigation im Internet erfolgt über die Navigationsleiste links.

---

# Erneuerbare Energien

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 1 Energie
- **1.1 Erneuerbare Energien**
- 1.1.1 Dünnschicht-Photovoltaik

**Beteiligte Institute:** [IEF](#)

**Verantwortlich:** Dr. Wolffhard Beyer, IEF-5, [w.beyer@fz-juelich.de](mailto:w.beyer@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)

[Patente](#)

---

## Highlight

### Elektromagnetische Feldverteilung in Solarzellen - Theorie und Experiment

Durch die numerische Berechnung der 3-dimensionalen elektromagnetischen Feldverteilungen mit Hilfe der ‚Finite Difference Time Domain (FDTD)‘ Methode ist es uns gelungen, Dünnschichtsolarzellen unter Berücksichtigung ihrer realen, auf der nm-Skala gemessenen Oberflächentopografie vollständig theoretisch zu beschreiben. Die Ergebnisse dieser Simulationen reproduzieren quantitativ experimentelle Ergebnisse aus der optischen Nahfeldmikroskopie. In einem nächsten Schritt wurde gezeigt, wie mit dieser Methode die Oberflächentextur unserer Solarzellen verbessert werden kann. Zusätzlich wurden numerische Berechnungen für die Zwischenreflektoren zwischen Top- und Bottomzelle von Tandemsolarzellen durchgeführt und optimierte Designvorschriften formuliert. Somit beherrschen wir theoretisch die elektromagnetische Feldverteilung und damit die optischen Eigenschaften der gesamten Solarzelle. Erste Experimente mit gezielt strukturierten Oberflächen und Zwischenreflektoren untersuchen derzeit die technische Umsetzbarkeit der errechneten Konzepte.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im Mittelpunkt der Arbeiten stehen Dünnschichtsolarzellen auf der Basis von Silizium und seinen Legierungen in amorpher und mikrokristalliner Form. Ziel der Entwicklung sind preisgünstige Photovoltaik-Module mit hohem Wirkungsgrad. Die Attraktivität dieser Technologie liegt in den geringen Materialkosten und den kostengünstigen Abscheideverfahren auf vielfältigen Substratmaterialien bei niedriger Prozesstemperatur. Das Arbeitsprogramm umfasst die Gesamtentwicklung von der Materialforschung über Solarzellenentwicklung, Prozesstechnologie bis zur Realisierung von Solarmodulen. Dabei soll die Technologie so weit entwickelt werden, dass sie von Industrie-Partnern bei geringen Transferkosten in die Produktion übertragen werden kann.

Es werden Stapelzellen (Tandem- und Tripel-Zellen) mit angepasster spektraler Absorption der Schichten entwickelt, um das Sonnenspektrum möglichst vollständig zu nutzen. Die speziellen Abscheideverfahren (vor allem Glimmentladung und die "Hot Wire"-Technik) mit niedrigen Temperaturen von 100-300°C ermöglichen den Einsatz günstiger und flexibler Substrate, wie z.B. Glas, Stahl oder Plastikfolien. Durch gezielt raugestaltete, transparente, leitende Schichten (TCO - Transparent Conducting Oxide), z.B. oberflächentexturiertes Zinkoxid, soll der Lichteintrag verbessert werden. Weiterführende Konzepte zielen darauf hin, langfristig Wirkungsgrade von 14% und mehr zu erreichen. Dazu muss das Sonnenspektrum möglichst vollständig und optimal ausgenutzt werden (Photonen-Management). Um dies zu erreichen werden neue

oberflächenstrukturierte Materialien, selektive Reflektoren innerhalb und an der Rückseite des Schichtsystems sowie angepasste Wellenleiterstrukturen erforscht und eingesetzt.

Die Jülicher Arbeiten umfassen die drei Programmthemen Material- und Solarzellenentwicklung, Prozesstechnologie und das Überzeichnungsvorhaben "Photonen-Management". Sie sind Teil des Helmholtz-Programms "Erneuerbare Energien", in dem neben der Photovoltaikforschung in Jülich und am HMI auch Arbeiten auf dem Gebiet solarthermischer Kraftwerke, konzentrierender Solartechnik und Systemanalyse (DLR) und Arbeiten zur geothermischen Stromerzeugung (GFZ) durchgeführt werden.

In der Photovoltaikforschung liegen die Schwerpunkte der Arbeiten am HMI bei Dünnschicht-Solarzellen aus Verbindungs-Halbleitern, insbesondere aus der Materialfamilie Cu (In, Ga) (S, Se)<sub>2</sub> und aus III-V Halbleitern. Dünnschicht-Solarzellen auf der Basis von Silizium werden sowohl im HMI als auch im FZJ entwickelt, wobei das HMI die Herstellung einer Solarzelle mit einem Saatschichtkonzept bei Prozesstemperaturen kleiner als 600°C anstrebt, während das FZJ die direkte Abscheidung von Silizium bei Temperaturen kleiner als 300°C verfolgt.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### Material- und Solarzellenentwicklung:

Die optische Absorption von  $\mu\text{-Si}$  unterhalb der Bandkante, gemessen mit Photothermischer Deflektionsspektroskopie (PDS), wurde verglichen mit der Spindichte aus der Elektronenspinresonanz. Ein nahezu linearer Zusammenhang zwischen Defektabsorption und Spindichte über 3 Größenordnungen legt nahe, dass die Defektabsorption von paramagnetischen Defekten bestimmt wird. Die Defektabsorption kann daher, mit Einschränkungen, als Optimierungsparameter für  $\mu\text{-Si:H}$ -Schichten empfohlen werden.

*S. Klein, F. Finger, R. Carius, T. Dylla, and J. Klomfass, J. Appl. Phys. 102, 103501 (2007).*

Wir haben eine direkte und einfache In-situ-Methode entwickelt, um die Kristallinität des Siliziums während der Deposition zu bestimmen. Hierzu analysieren wir mittels Optischer Emissionsspektroskopie die Ätzprodukte eines kurzen Zwischenätzschritts durch ein H<sub>2</sub>-Plasma. Der Vergleich mit Ex-situ-Messungen durch Ramanspektroskopie liefert sehr gute Übereinstimmung. Insbesondere kann der Parameterbereich des wichtigen Phasenübergangs mikrokristallin zu amorph präzise bestimmt werden.

*G. Dingemans, M. N. van den Donker, A. Gordijn, W. M. M. Kessels, and M. C. M. van de Sanden, Appl. Phys. Lett. 91, 161902 (2007).*

Die hohe Transparenz des am Institut entwickelten  $\mu\text{-Si}$ -Siliziumkarbids und seine gute Löcherbeweglichkeit wurde für n-p-Solarzellen mit außergewöhnlich hohen Kurzschlussströmen von 26.7 mA/cm<sup>2</sup> genutzt.

*F. Finger et al., invited lecture, 5th HWCVD conference, Boston (USA) 2008; Y. Huang, A. Dasgupta, A. Gordijn, F. Finger, and R. Carius, Appl. Phys. Lett. 90, 203502 (2007).*

ZnO und SnO<sub>2</sub> zeigen ein sehr unterschiedliches Verhalten im Wasserstoffplasma. Während SnO<sub>2</sub> schnell zu Zinn reduziert wird, wird ZnO wenig beeinflusst. Durch Analyse der Wasserstoffeindiffusion nach H-Plasmabehandlung mit Sekundärionen-Massenspektrometrie kann dieser Unterschied durch eine höhere Eindiffusion und langsamere Volumendiffusion von Wasserstoff im SnO<sub>2</sub> erklärt werden. Dadurch akkumuliert Wasserstoff im Oberflächenbereich und reduziert das Oxid. W. Beyer, J. Hüpkes, and H. Stiebig, Thin Solid Films 516,147 (2007).

#### Prozesstechnologie:

Die Firma Sontor (vormals Brilliant234, 100%ige Tochter von Q.Cells) hat im Sommer 2007 erfolgreich die Pilotproduktion von a-Si/?c-Si-Solarmodulen auf der Basis einer Lizenz des Forschungszentrum Jülich gestartet. Die Modulwirkungsgrade betragen auf Anhieb mehr als 7.5 %. Ein Ausbau der Pilotlinie zu einer ersten Stufe der Serienproduktion ist im Laufe des Jahres 2008 geplant.

*A. Gordijn, et al., Jahrestagung des Forschungsverbunds Sonnenenergie, 2007.*

Im Rahmen der vielen Industriekooperationen wurden insbesondere auf dem Gebiet der Deposition von  $\mu\text{-Si}$  weitere Prozessentwicklungen unter Berücksichtigung der für die Partner relevanten Prozessbedingungen durchgeführt. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf Homogenitäten, Gasverbrauch, Substratheizung durch das Plasma und Kontaminationen sowie die resultierenden Einflüsse auf Zell- und Modulwirkungsgrade. Beispielsweise wurden die kritischen Schwellwerte für den Basisdruck von

industrierelevanten Depositionsprozessen mit Hinsicht auf eine maximal erlaubte Verunreinigung des Absorbermaterials durch Stickstoff und Sauerstoff untersucht. Unter Laborbedingungen ist mit einem Basisdruck von  $10^{-7}$  Torr eine kritische Konzentration  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  von Sauerstoff im Absorber schon erreicht. Unter Produktionsbedingungen, gekennzeichnet durch hohen Druck und hohe Gasflüsse, wird dieser Wert erst bei  $10^{-5}$  Torr erreicht.

*J. Wördenweber, R. Schmitz, A. Mück, D. Hrunski, U. Zastrow, L. Niessen, A. Gordijn, W. Beyer, U. Rau, T. Merdzhanova, and H. Stiebig, submitted to 23rd EU PVSEC*

Durch Kombination von In-situ-Prozesskontrolle und Einsatz von intrinsischen  $\mu\text{-Si:H}$ -Pufferschichten aus HWCVD an der p/i-Grenzfläche wurden für  $\mu\text{-Si:H}$ -Solarzellen Leerlaufspannungen von über 600 mV erreicht.

*M. van den Donker, S. Klein, B. Rech, F. Finger, W. M. M. Kessels and M. C. M. van de Sanden, Appl. Phys. Lett. 90 183504 (2007).*

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Das IEF-5 ist Mitinitiator des Vernetzungsprojekts "Nanovolt" und eines Paketprojekts der DFG ("Optische Nanostrukturen für die Photovoltaik"). Gemeinsam mit Arbeitsgruppen aus Hochschulen, die in der Nanooptik spezialisiert sind, und außeruniversitären Forschungseinrichtungen werden anwendungsorientierte Grundlagenarbeiten für neue photovoltaische Strukturen auf der Basis optischer Nanostrukturen durchgeführt.

Drittmittelprojekte spielen für das IEF-5 eine wichtige Rolle. Sie dienen zum einen der Erarbeitung von Know-how über das FE Programm hinaus bzw. dem Technologietransfer, zum anderen geben sie über die Einnahmen dem Institut eine zusätzliche Flexibilität bezüglich Personal- und Sachmitteln. Ca 1/3 des Personals am IEF-5 wurde durch Drittmittel finanziert. Insbesondere im Rahmen des EU-Projekts ATHLET im 6. Rahmenprogramm und neuerdings auch im Rahmen des Verbundprojekts zur TCO-Entwicklung erfolgt ein intensiver Austausch mit dem HMI und weiteren Partnern. Im Rahmen eines großen Investitionsprojekts, unterstützt vom BMU, werden am IEF-5 Depositionsanlagen und großflächige Messtechnik aufgebaut.

Eine Vielzahl von Kooperationen mit Solarzellen- und Fabrikationsanlagenherstellern für Dünnschicht-Si-Solarzellen wurden verfolgt. Insbesondere werden in Kooperation mit verschiedenen Firmen, zwei Anlagenherstellern und mehreren Solarmodulproduzenten (Schott, Malibu, Sontor), IEF-5-Techniken in die Produktion überführt. Ein hochqualifizierter Wissenschaftler und Gruppenleiter (Dr. H. Stiebig) hat das IEF-5 verlassen und wechselte als Forschungs- und Entwicklungsleiter zu unserem Kooperationspartner Malibu GmbH.

### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

Die Auswirkung der lokalen Oberflächenstruktur texturierter ZnO-Schichten auf die Lichtausbreitung in dünnen amorphen Siliziumschichten wurde auf sub-Wellenlängenskala mit Nahfeldmikroskopie untersucht und mit Berechnungen der 3-dimensionalen Feldverteilungen mit der (FDTD)-Methode verglichen. Die beobachteten propagierenden und evaneszenten Moden, sowie die stark lokalisierte Lichtfelder an den Kraterspitzen werden von den Rechnungen sehr gut beschrieben. Damit verfügt man über die Voraussetzungen die Lichtausbreitung innerhalb realer Dünnschichtsolarzellen auf texturierten Substraten zu beschreiben und durch Rechnungen zu optimieren.

*K. Bittkau, R. Carius, and C. Lienau, Phys. Rev. B 76, 035330 (2007); C. Rockstuhl, F. Lederer, K. Bittkau, and R. Carius, Appl. Phys. Lett. 91, 171104 (2007).*

Numerischen Bauelementsimulationen von a-Si:H/ $\mu\text{-Si:H}$ -Tandemsolarzellen mit Zwischenreflektoren zeigen, dass durch unterschiedliche laterale Strukturgrößen und höhe von Frontkontakt und Zwischenreflektor die Lichtausbreitung von blauem und rotem Licht separiert werden kann. Im Vergleich mit einem konformalen Zwischenreflektor kann mit einem optimierten Design der Kurzschlußstrom der Zelle um etwa 10% gesteigert werden.

*P. Obermeyer, C. Haase, and H. Stiebig, submitted to Appl. Phys. Lett.*

Experimentell wurden Zwischenreflektoren auf der Basis von dotiertem mikrokristallinem Silizium eingebettet in SiO<sub>x</sub> entwickelt, die kompatibel mit den im IEF-5 verwendeten Abscheideprozessen sind. In a-Si/ $\mu\text{-Si}$ -Tandemzellen wurde damit eine Erhöhung des Kurzschlusstroms um 14% erreicht.

*A. Lambert, A. Dasgupta, W. Reetz, A. Gordijn, R. Carius, and F. Finger, in Proc. 22nd E-PVSEC, Mailand, 2007.*

# Weitere Programmentwicklung

## Material- und Solarzellenentwicklung

- Untersuchung der Defekte in amorphen und mikrokristallinen Silizium und Silizium-Legierungen mit Elektronenspinresonanz.
- Entwicklung und Herstellung von Proben für Hochfrequenz- und orts aufgelöste Elektronenspinresonanz-Messmethoden.
- Herstellung von  $\mu\text{-SiC}$  Legierungen mit dem HWCVD-Verfahren. Dotierung von  $\mu\text{-SiC}$  mit Al aus flüssigen Precursoren in einem neuen HWCVD-System.
- Untersuchung der Mikrostruktur von Schichten, die in Dünnschicht-Solarzellen eingesetzt werden, durch Effusion von implantiertem He, Ne und anderen Inertgasen.
- Untersuchung von Diffusionsprozessen, Mikrostruktur und mikroskopischen elektrischen Eigenschaften in TCO( $\text{ZnO}$ ,  $\text{SnO}_2$ )-Schichten.
- Untersuchung der Stabilität in verschiedenen Umgebungen und der elektronischen Eigenschaften von TCO-Materialien
- Studium von Instabilitäts- und Metastabilitäts- Phänomenen in  $\mu\text{-Si:H}$ -Einzelzellen and  $\text{a-Si:H}/\mu\text{-Si:H}$ -Tandem-Solarzellen.
- Untersuchung des Einflusses der Substratmorphologie auf elektronische Transporteigenschaften von  $\mu\text{-Si}$ .
- Nukleation, Wachstum und elektronische Eigenschaften von ultradünnen  $\text{Si:H}$ - und  $\text{SiC:H}$ -Schichten auf unterschiedlichen Substraten.

## Prozesstechnologie

- Transfer der neu entwickelten Prozesskontrolle auf großflächige PECVD-Reaktoren.
- Verifizierung von IEC-Standards für die Charakterisierung von Solarzellen und Solarmodulen bezüglich ihrer Anwendbarkeit im Gebiet von Dünnschicht-Photovoltaik.
- Transfer von neu entwickeltem Solarzell- und Solarmodulmessequipment (Homogenitätsmessplatz, Probenhaltersysteme mit pneumatischen Kontakten)
- Demonstration von hohen stabilen Wirkungsgraden (10 %) für kostengünstige Glasssubstrate (Floatglas) bei Anwendung kostengünstiger Sputter- und PECVD- Prozesse. Weiterentwicklung der Prozesse zur Steigerung der Depositionsraten und verbesserter Materialqualität.
- Methodenentwicklung zur opto-elektronischen Qualitätskontrolle von Solarmodulen.
- Entwicklung von  $\text{a-Si:H}/\mu\text{-Si:H}$ -Tandem-Solarzellen mit hohen Depositionsraten und einem Wirkungsgrad von 10% auf flexiblen Substraten.
- Untersuchung des Effekts von Reaktorreinigung mittels Plasma-Ätzverfahren auf die Eigenschaften von auf  $\text{a-Si:H}$  und  $\mu\text{-Si:H}$  basierenden Solarzellen.
- Untersuchung des Einflusses von Verunreinigungen (O, N, ..) auf die Eigenschaften von auf  $\text{a-Si:H}$  und  $\mu\text{-Si:H}$  basierenden Solarzellen.
- Entwicklung neuer Depositionsverfahren, insbesondere der kontinuierlichen Deposition von amorphem und mikrokristallinem Silizium mittels einer VHF-Linienquelle.
- Weiterentwicklung von Depositionsverfahren zur Herstellung von TCO-Schichten

## Überzeichnungsprojekt "Photonen Management"

- Untersuchung der Qualität des Lichteinfangs als Funktion der Topographie im Sub-Wellenlängenbereich. Dadurch Identifizierung von Verlustmechanismen hervorgerufen durch spezielle Oberflächenstrukturen.
- Ausdehnung der optischen Simulation auf Solarzellen mit integrierten zwei-/dreidimensionalen Gitterkopplern. Ermittlung der optimalen Gitterparameter für Dünnschicht-Solarzellen auf der Basis von numerischen Simulationen und Berechnung von Tandemstrukturen mit Zwischenreflektoren.
- Weitere Erhöhung der Stromdichte von  $\mu\text{-Si:H}$ -pin-Solarzellen und Erhöhung des Wirkungsgrades von Tandemsolarzellen durch Einsatz neu entwickelter Zwischenreflektoren.
- Verbesserung des Lichteinfangs in Solarzellen durch energie- und richtungsselektive Filter.
- Entwicklung von alternativen Verfahren zur Oberflächenstrukturierung für Lichtstreuung

# Rationelle Energieumwandlung

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 1 Energie
- **1.2 Rationelle Energieumwandlung**
- 1.2.1 Kraftwerkstechnik
- 1.2.2 Brennstoffzellen

**Beteiligte Institute:** [IEF](#), [ZAT](#), [ZCH](#), [ZEL](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Lorenz Singheiser IEF, [l.singheiser@fz-juelich.de](mailto:l.singheiser@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlights

### Brennstoffzellen

Hochtemperatur-Brennstoffzelle (SOFC):

Die Leistung der SOFC-Zellen wurde mittlerweile mit neuen Kathodenschichten bei sehr hohen Strömen stabilisiert (bei 700 mV wurden 2,5 A/cm<sup>2</sup> (1,75 W/cm<sup>2</sup>) bei 800°C und 1,5 A/cm<sup>2</sup> (1,05 W/cm<sup>2</sup>) bei 700°C erzielt). Selbst bei 650°C liefern diese Zellen noch bis zu 1 A/cm<sup>2</sup>. Damit sind sie in ihrer Leistungsfähigkeit weltweit unübertroffen. Zwei Hochleistungsstacks wurden für Langzeitmessungen in Betrieb genommen und hatten bis Ende 2007 bei geringer Degradation (10 mV/1000 h bei 700°C und 0,5 A/cm<sup>2</sup>) rund 4.000 Betriebsstunden erreicht.

Niedertemperatur-Brennstoffzelle (NTBZ):

Gründung eines Industriekonsortiums zur Entwicklung von DMFC-Energiesystemen für die Applikation Horizontal-Kommissionierer. Die dritte Generation eines DMFC-Systems konnte erstmals in einen elektrisch betriebenen Kommissionierer integriert werden. Aus Kerosin können durch Hydrofining (390 °C, 70 bar) in der flüssigen Phase mit vorgesättigtem Wasserstoff über einen kommerziellen Co-Mo/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Katalysator bis zu 3.000 ppmw Schwefel entfernt werden.

### Werkstoffe für die Kraftwerkstechnik

Im Rahmen der Helmholtz- Allianz - Ausschreibung konnte erfolgreich das Projekt MEM-BRAIN eingeworben werden, das die Entwicklung von Gasseparationsmembranen für neue Kraftwerkskonzepte mit CO<sub>2</sub>-Abtrenntechnologie zum Ziel hat. Beteiligt sind neben den HGF- Zentren FZJ, GKSS, DESY und HMI die Universitäten bzw Forschungseinrichtungen RWTH Aachen, RUB, TU Karlsruhe, VITO, Twente und CSIC.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Das übergeordnete Ziel der Forschungsarbeiten ist die Verbesserung der Effizienz der Energieumwandlung von (vorwiegend fossilen) Brennstoffen in Elektrizität. In unserer Gesellschaft besteht dabei die Anforderung, einerseits die wachsende Nachfrage nach hochwertiger Energie - vor allem Elektrizität - zu erfüllen,

andererseits jedoch die Ressourcen möglichst effizient einzusetzen und die Umwelt zu schonen. Dabei spielt die CO<sub>2</sub>-Reduktion eine entscheidende Rolle.

Im Rahmen des Programmthemas "**Brennstoffzellen**" werden in Jülich Zellen, Komponenten, Stacks und Systeme für die Hochtemperaturbrennstoffzelle mit Festoxidelektrolyt (SOFC) und für die Niedertemperaturbrennstoffzelle mit Polymerelektrolyt (DMFC) sowie Reaktoren und Systeme zur Reformierung, Entschwefelung und Brenngasreinigung für Mitteldestillate (Diesel, Kerosin und Heizöl) entwickelt. Dieses Thema ist strategisch auf die hocheffiziente Bereitstellung von elektrischer Energie für die mobile, portable und dezentrale stationäre Anwendung ausgerichtet. Seit Anfang 2006 konzentriert sich das FZJ auch auf die Hochtemperatur-PEFC (HT-PEFC) für Betriebstemperaturen ab 160°C. Der Leistungsmaßstab beträgt für die DMFC einige Kilowatt, für die HT-PEFC zwischen einem und fünfzig Kilowatt und für die SOFC einige bis mehrere hundert Kilowatt. Ziel ist die Technologieentwicklung für hochleistungsfähige, robuste und reproduzierbar zu fertigende Brennstoffzellen und Systemkomponenten, sowie die Entwicklung analytischer Methoden zu deren Diagnose.

Die Arbeiten konzentrieren sich im Bereich der Werkstoffe auf die Erhöhung der Leistungsfähigkeit und Lebensdauer sowie auf die Reduzierung der Werkstoff- und Herstellkosten. Die Identifikation der Degradationsmechanismen im Stack und deren detaillierte Analyse und Vermeidung sind eine weitere Säule der Aktivitäten. Neu hin zu gekommen sind Verfahren zur beschleunigten Prüfung von Komponenten. Auf der anderen Seite stehen die Entwicklung fortgeschrittener Designs, automatisierter und reproduzierbarer Fertigungsverfahren, hoch-integrierter Systemtechnik sowie die optimale Einbindung von Brennstoffzellen in Systeme. Wichtige flankierende Aktivitäten sind die Modellierung von Komponentenbelastungen und Transportvorgängen, die Analytik und die systemanalytische Charakterisierung und Bewertung von Brennstoffzellensystemen.

Das Programmthema "**Werkstoffe für die Kraftwerkstechnik**" hat zum Ziel, die Wirkungsgrade von Kraftwerken auf Basis von Kohle, Erdgas und Biomasse durch neuartige Verbrennungsverfahren und Prozesse sowie durch Werkstoffe und Beschichtungen mit höherer Festigkeit, Korrosionsbeständigkeit und Wärmedämmeigenschaften drastisch zu erhöhen und Emissionen deutlich zu senken. Damit soll ein wichtiger Beitrag für eine zuverlässige, ressourcen- und umweltschonende Stromversorgung über das Jahr 2020 hinaus geleistet werden. Die Umsetzung der Ergebnisse aus diesem HGF- Programmthema in die industrielle Anwendung ist vor dem Hintergrund, dass bis zum Jahr 2020 nicht nur in Deutschland, sondern auch EU- weit ca. 40 % der heute installierten Kraftwerksleistung ersetzt werden müssen, von hoher wirtschaftlicher und ökologischer Bedeutung. Andere Verfahren werden zur Produktion von Elektrizität in großtechnischem Maßstab heute und voraussichtlich in den nächsten 10 bis 15 Jahren nicht ausreichend zur Verfügung stehen, die bei einem Planungszeitraum von ca. 10 Jahren für großtechnische Anlagen und flächendeckende Versorgungsstrukturen erforderlich sind. Längerfristig ist angestrebt, durch die Entwicklung geeigneter Verfahren CO<sub>2</sub> abzutrennen und damit den CO<sub>2</sub>-Ausstoß aus Kraftwerken erheblich zu senken. Die Forschungsarbeiten am Forschungszentrum Jülich konzentrieren sich im Rahmen eines bewilligten Additional- Funding - Projektes auf die Entwicklung geeigneter Membranen für die Abtrennung von Sauerstoff bzw. CO<sub>2</sub> und die Bewertung von Hochtemperaturwerkstoffen und Beschichtungen unter OxyFuel- bzw. neuartigen Vergasungsbedingungen. Systemanalysen zur Wirkungsgradoptimierung und Kostenermittlung unter Berücksichtigung von CO<sub>2</sub>-Transport und Lagerung begleiten diese Forschungsarbeiten, die im FZJ durch die Einrichtung eines Projektes unter Beteiligung von IEF-1, IEF-2, IEF-3 mit Unterstützung durch die Programmgruppe IEF-STE und die Zentralabteilungen ZAT und ZCH durchgeführt wird. In 2007 konnte erfolgreich das HGF Allianz - Projekt MEMBRAIN sowie mehrere Verbundvorhaben für die Entwicklung neuer Kraftwerksprozesse und von Membranen eingeworben werden.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### Hochtemperatur-Brennstoffzellen (SOFC)

Die Aufklärung der Degradationsmechanismen in SOFC-Zellen und -Stacks stellt seit 2007 einen wesentlichen Schwerpunkt der FZJ-Arbeiten dar. Mehrere Doktorarbeiten konzentrieren sich auf verschiedene Aspekte der Degradation und werden durch weitere Arbeiten in 2008 ergänzt. Damit soll mittelfristig eine möglichst umfassende Aufklärung und Bewertung der Mechanismen und antreibenden Kräfte (mechanisch, thermisch und chemisch) erfolgen.

*R. Steinberger-Wilckens, J. Mergel, A. Güsen, K. Wippermann, I.C. Vinke, P. Batfalsky, M.J. Smith: Performance degradation and failure mechanisms of fuel cell materials. In: M. Gasik (Ed.): Materials for Fuel Cells, Woodhead Publishing, to be published in 2008.*

SOFC-Meilenstein 2007: "Optimised cell and stack materials for the operation with biogenic fuel gases": Es wurden umfassende Messungen mit Schwefel-verunreinigtem Brenngas bei Konzentrationen durchgeführt, wie sie sowohl in Biogas als auch in Erdgas vorkommen. Die Mechanismen der Schwefel-Vergiftung konnten weitgehend, auch im Dialog mit anderen, internationalen Arbeitsgruppen geklärt werden. Allerdings zeigte sich, dass die Desensibilisierung mit üblichen Schwefel-Katalysatoren aus der Mineralöl-Verarbeitung unter SOFC-Bedingungen nicht gelingt. Zudem bilden sich unter diesen Bedingungen korrosive Verbindungen, die sämtliche Systemkomponenten angreifen würden. Daher muss weiter auf eine Entschwefelung des Brenngases gesetzt werden. Eine Lösung könnten neue, Nickel-freie Anoden darstellen, die in jüngerer Zeit am FZJ untersucht werden. Bisher zeigen diese jedoch nur eine geringe elektrochemische Leistung, so dass hier noch wesentliche Optimierungsarbeit zu leisten ist.

*A. Braun, M. Janousch, J. Sfeir, J. Kiviahio, M. Noponen, F.E. Huggins, M.J. Smith, R. Steinberger-Wilckes, P.J. Holtappels: Molecular speciation of sulfur in solid oxide fuel cell anodes with x-ray absorption spectroscopy. Accepted for publishing, J. Power Sources.*

Weitere Arbeiten SOFC: "Erfüllung der automobilen Anforderungsprofile an Leichtbau-Stacks" In der Kooperation mit BMW wurden umfangreiche Charakterisierungen von Stacks unter transienten Lastbedingungen durchgeführt, wie sie für den automobilen Betrieb typisch sind. Dabei zeigte sich, dass selbst anspruchsvolle Transienten (thermisch und Reoxidation) innerhalb der gemeinsam mit BMW entwickelten Betriebsfenster mehrere hundert Male durchfahren werden können. Die von BMW und FZJ entwickelten Stacks erreichen damit zunehmend die für den Praxiseinsatz notwendige Robustheit.

### **Niedertemperatur-Brennstoffzelle (NTBZ)**

NTBZ-Meilenstein 2007: " Life cycle proof of technically produced non-fluoride MEAs in DMFC operation ( 4000 hours)" Der Meilenstein 2007 sah vor, eine Lebensdauer von mehr als 4.000 h für nicht-fluorierte DMFC-MEAs nachzuweisen. Die Entwicklung und Herstellung von fluorfreien Membranen für die DMFC erwies sich als aufwändiger als geplant, da sich die Materialien als nicht ausreichend stabil herausstellten, so dass die Entwicklung einer neuen Polymerklasse notwendig wurde. Erste MEAs mit diesen Membranen stehen erst seit Ende 2007 zur Verfügung. Weltweit werden die besten Leistungs- und Alterungsergebnisse zurzeit mit fluorierten Membranen wie Nafion® erreicht, so dass sich die DMFC-Entwicklungen auf diesen Membrantyp konzentriert haben und auch weiter konzentrieren werden.

Die MEA-Fertigung mit Nafion-Membranen wurde weitgehend automatisiert. Gasdiffusionslagen und Gasdiffusionselektroden werden auf einer Beschichtungsmaschine im Technikumsmaßstab in einem kontinuierlichen Prozess von Rolle zu Rolle in einer Breite von 45 cm hergestellt. Die auf Maß gestanzten Komponenten werden durch einen Industrieroboter zu einer MEA mit Dichtungen (7-lagige MEA) assembliert und einer Pressstrecke bestehend aus einer Heiß- und einer Kühlpresse zugeführt, die über hand-shake Signale mit dem Roboter synchronisiert sind. Aus den so gefertigten MEAs wurden am FZJ leistungsfähige DMFC-Stacks gebaut und bis zu 3.000 h mit einem Abfall der mittleren Zellspannung von < 50  $\mu\text{V}/\text{h}$  im Betriebspunkt betrieben, so dass von einem alterungsstabilen Betrieb der MEAs von über 4.000 h auszugehen ist.

### **Weitere NTBZ-Arbeiten**

Auf dem Weg zur Entwicklung seriennaher DMFC Systeme wurde die Scooter-Technologie auf einen Horizontalkommissionierer übertragen. Ein optimiertes System-Packaging erlaubte, das komplette DMFC-System in den vorgegebenen Bauraum des Batterietroges zu integrieren. Um den extremen Leistungsanforderungen (bis zu 7 kW Peakleistung für Anfahren und Bremsen) gerecht zu werden, wurden zusätzlich zum 1,6 kW DMFC-Stack hochstromfähige Bleiakumulatoren eingesetzt.

Bei elektrochemischen und analytischen Untersuchungen zur Aufklärung von Alterungsmechanismen wurde Rutheniumkorrosion in den Anoden als Hauptursache für die Degradation identifiziert. Daneben tragen metallische Verunreinigungen und Komplexbildner, z.B. Chlorid, zur Alterung bei. Es wurde nachgewiesen, dass parasitäre Ströme zur Degradation auch während einer Stillstandsphase führen.

Ein spezielles Charakterisierungsverfahren wurde entwickelt, um aus Einzelzellmessungen physikochemische Daten der MEA unter Systembedingungen zu ermitteln, u.a. zur Auslegung von Systemkomponenten. Ein Prüfstand für zeitsparende Reihenuntersuchungen wurde damit aufgebaut.

Die Entwicklung von Hochtemperatur-Polymerelektrolyt-Brennstoffzellen (HT-PEFC) wurde 2007 auf allen Integrationsebenen von der Elektrodenentwicklung bis zur Verifikation eines Gesamtsystems im 5 kW-

Maßstab fortgesetzt. Die Leistungsfähigkeit der entwickelten MEAs konnte nahezu ohne Leistungseinbuße von Einzelzellen auf einen Stack der 100 W-Klasse übertragen werden.

In enger Zusammenarbeit der Fachabteilungen wurde eine 5 kW Laboranlage ("Brass-Board System") konzipiert, um das Zusammenspiel von Reaktoren (Reformierung und Wasser-Gas-Shift) zur Brenngaserzeugung aus Diesel und Kerosin mit HT-PEFC-Stacks zu untersuchen. Basierend auf einem gemeinsam erarbeiteten Verfahrenskonzept wurde das "Brass-Board System" aus zwei Teilsystemen aufgebaut, eine Anlagensteuerung entwickelt und implementiert. Ende 2007 wurde mit der Inbetriebsetzung der einzelnen Anlagenteile begonnen.

Die Langzeitexperimente zur autothermen Reformierung von entschwefeltem Kerosin wurden nach einer Betriebszeit von 2.000 h und einem Umsatz von 99 % unterbrochen. Eine Regeneration des Katalysators durch Abbrand von kohlenstoffhaltigen Ablagerungen konnte den Kerosinumsatz wieder auf 99,8 % zurückführen. Dies untermauert die Aussage, dass diese Reaktoren ohne nennenswerte Alterung betrieben werden können.

Zur Entschwefelung von Kerosin und Heizöl EL in der flüssigen Phase wurden zehn Verfahren identifiziert, von denen zunächst sechs durch Screening-Experimente und später vier im Labormaßstab untersucht wurden. Ausschlusskriterien waren die Betriebsbedingungen der Verfahren wie Druck, Temperatur, Regenerierbarkeit, Verfügbarkeit notwendiger Materialien und Hilfsstoffe sowie technische Reife der Prozesse. Für die Grobentschwefelung eignen sich die destillative Abtrennung sowie die Pervaporation und für die Feinentschwefelung die Adsorption. Das katalytische Hydrofining mit vorgesättigtem Wasserstoff in der flüssigen Phase deckt die Grob- und Feinentschwefelung ab. Im 5 kW-Maßstab wurden die destillative Abtrennung und das Hydrofining erfolgreich getestet.

Im Rahmen der Verfahrens- und Systemanalyse wurde ein Modell zur Kostenprognose von individuellen Niedertemperatur-Brennstoffzellen erarbeitet. Die methodische Grundlage des Modells ist eine modifizierte und erweiterte massenspezifische Kostenprognose. Dazu wurden umfangreiche Datenrecherchen zu den Kosten und Massen der Brennstoffzellenkomponenten durchgeführt. Potentiale zur Kostenverringerung einzelner Komponenten können mittels der Prognose aufgedeckt und identifiziert werden. Erste Anwendungen auf Beispielsysteme verliefen erfolgreich.

### **Benchmarking**

Komponenten des FZJ werden im SOFC-Bereich als weltweit mitführend erachtet und an vielen Stellen von Partnern in ihrer Forschungsarbeit eingesetzt. FZJ-Zellen erreichen die höchsten Leistungsdichten in technisch relevanten Zellgrößen. Sowohl die konventionellen als auch die Leichtbau-Stacks können sich in vielen Bereichen mit industriell gefertigten Komponenten messen oder sind ihnen überlegen. Dieser Umstand führte u.a. zu dem in 2007 abgeschlossenen Technologietransfer zu Compagnie SaintGobain.

Die an den NTBZ-Aktivitäten beteiligten Wissenschaftler und deren FuE-Ergebnisse nehmen in Europa und weltweit eine führende Position ein. Dies zeigt sich an dem hohen Stand der entwickelten Produkte, die im Vergleich zum internationalen Wettbewerb führend bewertet werden. Die an den Entwicklungen beteiligten Wissenschaftler bringen sich hervorragend in entsprechenden deutschen und europäischen Netzwerken und Gremien ein, in denen sie z.T. auch aktive (Führungs-)Aufgaben übernehmen und damit die Roadmap für die Entwicklung der H2- und BZ-Technologie wesentlich mitgestalten.

### **Werkstoffe für die Kraftwerkstechnik**

Die Reproduzierbarkeit und die Leistungsfähigkeit der Wärmedämmschichtsysteme konnte durch den Einsatz von Diagnostikverfahren und durch die Entwicklung neuer Wärmedämmschichten weiter erhöht werden.

### **Diagnostikmethoden für reproduzierbare Schichtherstellung**

Die in die thermischen Spritzanlagen implementierten Verfahren zur Partikel-Diagnostik wurden zur Prozesskontrolle und zur Verbesserung des Prozessverständnisses genutzt und die Verlässlichkeit der generierten Daten untersucht. Besonders bei der Partikeltemperaturmessung wurden größere Abweichungen gefunden, die auf verschiedene physikalische Effekte zurückgeführt werden konnten.

Die Diagnostikverfahren wurden auch intensiv genutzt, um gezielt die Mikrostruktur von Schichtsystemen zu optimieren. So wurden segmentierte Schichtmorphologien mit hoher Dehnungstoleranz entwickelt. Diese Arbeiten erfolgten z. T. im Rahmen des EU-Projektes "Topcoat". Auch das Suspensionsplasmaspritzen wurde weiter vorangetrieben. Wärmedämmschichten mit sehr hohen Reflektivitätswerten zur effektiven Reduzierung der Strahlungswärmeleitung konnten entwickelt werden.

Im Bereich der Gasbrenner-Zyklierstände lag das Augenmerk auf der Entwicklung von Monitoring - Werkzeugen zur frühzeitigen Detektion von Schädigungen. Zum Einsatz kamen dabei die Schallemission und die Infrarot-Thermographie. Speziell bei der Schallemission ist die Minimierung und Filterung von Nebengeräuschen ein wesentliches Arbeitsfeld.

#### Neue Wärmedämmschichtsysteme für höhere Einsatztemperaturen

Die Arbeiten bei den neuen Wärmedämmschichtmaterialien konzentrierten sich auch weiterhin auf Pyrochlore, Perowskite und Hexaaluminate. Im Bereich der Pyrochlore wurden die am IEF-1 entwickelten Doppellagensysteme in eine Reihe von Projekten eingebracht. Ein weiterer Schwerpunkt liegt auf den Perowskiten mit sehr hohem Schmelzpunkt wie z.B.  $(\text{Ba}(\text{Mg}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3)$ , für die eine spezifische Beschichtungstechnologie entwickelt wird.

Oxidationsbeständigere  $\text{MCrAlY}$  - Haftvermittlerschichten konnten im Berichtszeitraum entwickelt werden, die durch Zusatz an Zr dehnungstolerantere Aluminiumoxidschichten aufweisen als herkömmliche Zusammensetzungen. Neben der Legierungszusammensetzung spielt die genaue Kontrolle der Sauerstoffverunreinigungen in der Prozessatmosphäre während des Beschichtens, die Oberflächenrauigkeit der Haftvermittlerschicht sowie die abschließende Wärmebehandlung der beschichteten Komponenten eine zentrale Rolle für die Lebensdauer keramikbeschichteter Hochtemperaturbauteile.

G. Mauer, R. Vaßen, D. Stöver, *Comparison and Applications of DPV-2000 and Accuraspray-g3 Diagnostic Systems*, *J. Thermal Spray Technology*, 16 (3) (2007) 414-424.

A. Casu, J.-L. Marques, R. Vaßen, D. Stöver, *Modelling of crack growth near the metallic-ceramic interface during thermal cycling of air plasma sprayed thermal barrier coatings*, *Key Engineering Materials Vol.333*, pp. 263-267, (2007)

Mauer, G., Vaßen, R., Marqués-López, J.-L., Stöver, D., *Detection of Wear in one-cathode plasma torch electrodes and its impact on velocity and temperature of injected particles*, *J. of Thermal Spray Technology*, 16 (5-6) (2007) 933-939.

A. Stuke, R. Carius, J.-L. Marqués, G. Mauer, M. Schulte, D. Sebold, R. Vaßen, D. Stöver, *Optimization of the reflectivity of air plasma sprayed ceramic thermal barrier coatings*, *31st Int. Cocoa Beach Conference & Exposition on Advanced Ceramics & Composites*, Daytona Beach, FL, Jan 21-26, 2007.

#### Lebensdauermodelle für keramische Wärmedämmschichten in industrielle Anwendung überführt

Ein analytisches Modell zur Lebensdauerbeschreibung von EB-PVD Wärmedämmschichten aus YSZ auf gekrümmten Oberflächen wurde entwickelt. Grundlage für die Modellierung bildeten experimentelle Ergebnisse von zylindrischen Proben mit unterschiedlichem Radius, die unter isothermen und zyklischen Oxidationsbedingungen bei Maximaltemperaturen zwischen 1050 und 1150°C bis zur Schichtablösung beansprucht worden waren. Das Modell muss noch weiterentwickelt werden für eine industrielle Anwendung.

Mit einer vereinfachenden analytischen Beziehung wurde die radiale Eigenspannung an der Grenzfläche zwischen thermisch gewachsener Oxidschicht (TGO) und Haftvermittlerschicht als Funktion von TGO-Dicke und Probenradius formuliert. Als Kriterium für das Versagen der Schicht (Delamination) wurde das Übersteigen eines kritischen Haftungswertes an dieser Grenzfläche angenommen. Unterschiede in der Lebensdauer zwischen isothermer und zyklischer Oxidation wurden nicht in die Beschreibung einbezogen, da sie auch in den Experimenten nicht signifikant auftraten. Die Validierung des entwickelten Lebensdauermodells keramikbeschichteter Nickelbasiskomponenten durch industrielle Anwender zeigt bis zu mittleren Lebensdauern sehr gute Übereinstimmung mit Betriebserfahrungen. Die Validierung für Lebensdauern > 15000 Stunden erfordert Langzeituntersuchungen im Labormaßstab.

O. Trunova, T. Beck, R. Herzog, R.W. Steinbrech, L. Singheiser: *Damage Mechanisms and Lifetime Behavior of Plasma Sprayed Thermal Barrier Coating Systems for Gas Turbines - Part I: Experiments*, *Surface and Coatings Technology*, Accepted - in Press, <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2008.05.006>

#### Wasserdampfinduzierte und feuerseitige Hochtemperaturkorrosion in Dampfkraftwerken

Die beschleunigte Oxidation der ferritisch-martensitischen Stähle mit 9 bis 12 % Cr in Wasserdampf ist auf die Löslichkeit von Wasserstoff in der Legierung zurückzuführen, der bei der Reaktion von Wasserdampf mit

Legierungsbestandteilen der Stähle unter Oxidbildung entsteht. Dadurch wird die Auswärtsdiffusion von Cr reduziert, sodaß keine langsam wachsenden Chromoxidschichten entstehen können. Dies bedeutet, dass diese Werkstoffklasse in Dampfkraftwerken bestenfalls bis zu 600 °C eingesetzt werden kann. Für höhere Dampftemperaturen müssen austenitische Werkstoffe mit > 18 Gew.-% Cr verwendet werden, die recht gute Langzeitbeständigkeit aufweisen. Für Dampfkraftwerke mit > 700 °C sind aus Festigkeitsgründen Nickelbasislegierungen wie Alloy 617 oder C 263 zwingend erforderlich, deren Beständigkeit in Wasserdampf auf Basis der bisher erarbeiteten Untersuchungen ebenfalls als gut einzustufen ist.

Deutlich höhere Dampfkorrosionsbeständigkeit weisen ferritische Legierungen mit 22 % Cr auf, die durch Lavesphasenverstärkung vergleichbare Zeitstandfestigkeit besitzen wie P92. Durch diesen Verfestigungsmechanismus bietet sich die Möglichkeit, die Einsatztemperaturen von Stählen auf über 600 °C anzuheben. Entsprechende Anträge für Verbundvorhaben wurden positiv begutachtet und werden im Laufe des Jahres 2008 bewilligt werden.

Untersuchungen zur feuerseitigen Hochtemperaturkorrosion von Nickelbasislegierungen wurden in 2007 begonnen mit dem Ziel, das Gefährdungspotential dieser Werkstoffklasse gegen sulfatinduzierte Hochtemperaturkorrosion bei Kohlefeuerung zu untersuchen. In schwerölgefeuerten Gasturbinen führt diese Variante der Hochtemperaturkorrosion durch kondensierte Alkalisulfate zu rascher Zerstörung der Beschauflung bei Temperaturen > 670°C.

*P.J.Ennis, W.J.Quadackers; Mechanisms of steam oxidation in high strength martensitic steels, International Journal of Pressure Vessels and Piping, 84 (1-2) (2007), 75 - 81*

*P.J.Ennis, W.J.Quadackers; Implications of steam oxidation for the service life of high strength martensitic steel components in high temperature plant, International Journal of Pressure Vessels and Piping, 84 (1-2) (2007) 82 - 87*

### Korrosionsverhalten von Werkstoffen für die Kraftwerkstechnik in Oxyfuelatmosphären

Ziel der Untersuchungen ist es, die Beständigkeit von Hochtemperaturwerkstoffen und Beschichtungen für Dampfkraftwerke und Gasturbinen auf ihre Eignung für Oxyfuelprozesse mit hohem CO<sub>2</sub>- Gehalt zu untersuchen. Ferritische Stähle bis 12 % Cr zeigen massive Oxidation und Aufkohlung in CO<sub>2</sub> und CO<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O Gasgemischen bereits bei 550°C, Zusätze an Sauerstoff reduzieren die Oxidationsrate kurzzeitig, nach längeren Zeiten tritt beschleunigte Oxidation und innere Aufkohlung auf. Austenitische Werkstoffe mit > 20 % Cr und > 18 % Nickel sowie Nickelbasislegierungen sind beständig, da sie dichte Chromoxidschichten ausbilden. Die Untersuchungen werden mit variablen Sauerstoffgehalten in Oxyfuelatmosphären sowie bei höheren Temperaturen fortgesetzt.

### Chemische Heißgasreinigung im Oxycoal-AC-Prozess

Thermochemische Modellrechnungen haben gezeigt, dass es auf den Rohren der Rezirkulation und in der Sauerstoffmembran im Oxycoal-AC-Prozess zur Kondensation von Alkalisalzen (Sulfate und Karbonate) kommt. Diese führen zu Korrosion der Werkstoffe und Zusetzen der Membran. Neuere Simulationsrechnungen und experimentelle Untersuchungen mit der Molekularstrahl-Massenspektrometrie zeigen, dass mittels alumosilikatischer Sorbentien, z.B. Bentonit, die vor dem Heißgasfilter zugegeben und dann mit der Asche bei 800°C abfiltriert werden, der Alkaligehalt im Rauchgas auf Werte deutlich unter 1 ppm gesenkt werden kann. Damit läßt sich für Braunkohlen die Kondensationstemperatur der Alkaliverbindungen auf deutlich unter 700°C senken, so dass die Membran bei Temperaturen oberhalb 700°C betrieben werden kann und keine Heißgaskorrosion an den Rohren aus Ni-Basislegierungen auftreten sollte. Bei Steinkohlen können vergleichbare Kondensationstemperaturen nur durch eine zusätzliche Heißentschwefelung erreicht werden.

*C. Weber, E. Yazhenskikh, M. Müller, "Thermodynamic Modelling of Ash Related Problems in the OXYCOAL-AC-Process", CD-ROM Proceedings of the 24th International Pittsburgh Coal Conference, Johannesburg, South Africa, 2007, 21-4.pdf.*

*C. Weber, M. Müller, "Thermodynamische Modellrechnungen zum OXYCOAL-AC-Prozess", VDI-Berichte 1988, 23. Deutscher Flammentag, Berlin, 2007, p. 503-508.*

## **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

### Nachwuchsförderung und Vernetzung

Das FZJ ist kontinuierlich über eine Vielzahl von Diplom- und Doktorarbeiten mit verschiedensten deutschen Universitäten verzahnt. Die intensive Mitarbeit in Arbeitskreisen und Projekten des Kompetenznetzwerks

"Wasserstoff und Brennstoffzellen" des Landes NRW fördert zusätzlich die Zusammenarbeit auf Landesebene.

Für den Bereich der Computermodellierung der atomaren Mechanismen der Sauerstoffreduktion auf dem SOFC-Kathodenmaterial (LSM) konnte ein Alexander von Humboldt-Forschungsstipendiat gewonnen werden. Eine amerikanische Austauschstudentin beschäftigt sich im Rahmen des Parlamentarischen Partnerschafts-Programms (PPP) des Deutschen Bundestages für ein Jahr mit der orts aufgelösten Charakterisierung von DMFC-Einzelzellen sowie der Untersuchung von Degradationseffekten. Im Projekt Real-SOFC wurden 3 Nachwuchswissenschaftler des IPMS Kiev, der Universität Leoben und der INSA Lyon jeweils für 3 Monate am FZJ aufgenommen.

Das FZJ arbeitet darüber hinaus im Rahmen des Virtuellen Instituts "Asymmetrische Strukturen für die PEM-Brennstoffzelle" mit GKSS und drei Universitäten (HH, KI und UL) an der Untersuchung der elektrochemischen Eignung und der Permeabilität von MEA-Strukturen. Daneben bestehen enge FuE-Kooperationen mit dem ISEA der RWTH Aachen auf dem Gebiet der elektrochemischen Impedanzspektroskopie und mit der Universität Düsseldorf auf dem Gebiet der Trennmembranen. Auf europäischer Ebene arbeitet das FZJ in einem aus etwa 30 Partnern aus Wissenschaft und Industrie zusammengesetzten Netzwerk an der Koordination der Entwicklung von MEAs für HT-PEFCs.

Im Bereich der Kraftwerkstechnik konnte für die Vernetzung mit den Hochschulen des Landes NRW, in Deutschland und Europa weitere Fortschritte erzielt werden. Die intensive Mitarbeit im NRW-Netzwerk "Kraftwerkstechnik" sowie in den Arbeitsgruppen der Coorettec-Initiative fördert die Zusammenarbeit auf Landes- und Bundesebene. Gemeinsam mit der RWTH Aachen startet das FZJ eine Forschungsallianz (JARA) auf den Gebieten Neuro- und Simulationwissenschaften (BRAIN und SIM) sowie Informationstechnologie (FIT). JARA-SIM bietet ein Wissenschafts- und Kompetenzzentrum für computergestützte Natur- und Ingenieurwissenschaften auf Weltklasse-Niveau, an dem die Jülicher Brennstoffzellenforschung mit eigenen Modellierungs- und Simulationsaktivitäten beteiligt ist.

Im Aufbau ist JARA-Energy als vierte Sektion der Forschungsallianz JARA mit dem Ziel, die bereits enge Kooperation mit der RWTH Aachen im Bereich der Energieforschung deutlich zu intensivieren.

Zur Nachwuchsförderung tragen vor allem Verbundvorhaben mit der Industrie, aber auch die Beteiligung an SFBs und Schwerpunktprogrammen der DFG bei. Auf dem Gebiet der Materialforschung für die Kraftwerkstechnik wurde eine Emmy-Nöther - Nachwuchsgruppe von der DFG bewilligt. Positiv wurde auch die 4. Runde des SFB 561 "Offenporige Mehrschichtsysteme für Kombikraftwerke mit 65 % Wirkungsgrad" an der RWTH Aachen beurteilt.

### Strategische Partnerschaften

FZJ hat die Vorhaben ZeuS III und ENSA in Kooperation mit BMW und einem Konsortium verschiedenster Industriefirmen erfolgreich mit beantragt und entscheidend geprägt. Im Rahmen dieser Projekte (Laufzeit 2005 bis 2008 und 2007 bis 2010) wurde das 'CS'-Leichtbau-SOFC-Kassetten-Design für die Anwendung in Automobilen entwickelt, das gegenwärtig zur Industrialisierungsreife geführt wird.

Das vom FZJ koordinierte Integrierte Projekt Real-SOFC (im 6. Rahmenprogramm der EU, Laufzeit 2004-2008, 26 europäische Partner) stellt im Bereich SOFC ein Schlüsselprojekt der EU dar und konzentriert sich auf die Entwicklung von SOFCs mit hoher Lebensdauer.

Der Technologietransfer der Jülicher SOFC-Technik im Rahmen der strategischen Kooperation mit Compagnie Saint-Gobain (High Performance Materials) wurde 2007 abgeschlossen.

Im Rahmen einer transatlantischen Forschungskooperation mit dem Oak Ridge National Laboratory werden Materialien und Methoden entwickelt, um kostengünstige, leistungsfähige Brennstoffzellensysteme für Transport und Stromversorgung zu ermöglichen.

Mit der niederländischen Forschungseinrichtung ECN besteht eine strategische Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Brenngaserzeugung für Brennstoffzellenanwendungen, die zur effizienteren und arbeitsteiligen Bearbeitung von FuE-Themen genutzt wird.

Als Ergebnis einer Machbarkeits- und Marktstudie sowie der Bemühungen einer Kooperationsanbahnung arbeitet das FZJ mit vier Industriepartnern in einem Projektkonsortium an der Entwicklung eines marktfähigen DMFC-Energiesystems für einen Horizontal-Kommissionierer.

Gemeinsam mit der Airbus Deutschland AG führt das FZJ FuE-Aktivitäten auf den Gebieten der Brennstoffzellenanwendungen zur Anbord-Stromerzeugung (Flugzeug) aus Kerosin durch.

Im Bereich der Kraftwerkstechnik bestehen strategische Kooperationen mit Herstellern und Anlagenbauern auf dem Gebiet der Werkstoff- und Schichtherstellern, die deutlich ausgebaut werden konnten. Ausgebaut wurde die Vernetzung auf dem Gebiet der Membranforschung durch die Bewilligung von MEMBRAIN und das eingereichte Verbundvorhaben MEM-OXYCOAL, die erheblich zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses beitragen.

#### Mitarbeit in nationalen und EU-Gremien

FZJ stellt die deutschen ExCo-Mitglieder für das Programm ‚Advanced FEI Cells‘, sowie für viele Annex-Arbeitsgruppen zu diesem Thema.

Vertreter des FZJ beteiligten sich bis Ende 2007 auf EU-Ebene wesentlich an der Arbeit der European Hydrogen and Fuel Cell Technology Platform im Hinblick auf die strategische Vorbereitung einer Joint Technology Initiative (JTI) unter Beteiligung der europäischen Forschungseinrichtungen. In 2008 wird diese Arbeit im Rahmen der JTI und ihrer vorbereitenden Strukturen an verantwortlichen Positionen fortgesetzt.

Auf nationaler Ebene wurde im Stategierat mitgearbeitet und der Nationale Entwicklungsplan Wasserstoff und Brennstoffzellen mitgestaltet. Im Zuge der Einrichtung der Nationalen Organisation für Wasserstoff und Brennstoffzellen (NOW) stellt das FZJ das für die deutsche Forschung zuständige Mitglied des NOW-Beirats.

Im Bereich der Kraftwerkstechnik arbeitet das FZ Jülich intensiv in den Arbeitsgruppen von Cooretec sowie im Beirat an effizienten Strategien und Fragestellungen der Energietechnik mit, auf Landesebene im Netzwerk "Kraftwerkstechnik" des Landes NRW.

#### Drittmittleinwerbung und Technologietransfer

2007 flossen in den SOFC-Bereich Drittmittel vom BMWi (4 Projekte), der EU (5 Projekte), aus bilateralen Vorhaben mit Industriepartnern (6 Projekte) und aus Lizenzierungen/Technologie-Transfer (3 Verträge) ein. Für die Modellierung (typenübergreifend) wurde ein STREP unter Leitung des FZJ akquiriert (GENFC).

Im Bereich der Niedertemperatur-Brennstoffzellen erfolgte die Projektförderung durch die Europäische Kommission (1 Projekt), das BMWi (4 Projekte), BMBF (2 Projekte), MWME und MIWFT des Landes NRW (2 Projekte) sowie in bilateraler Kooperation mit der Industrie (4 Projekte).

Die erfolgreiche Drittmittleinwerbung auf dem Gebiet der Werkstoffsysteme für die Kraftwerkstechnik konnte in 2007 ebenfalls fortgesetzt werden. Bewilligt wurde die 4. Phase des SFB 561 sowie mehrere Verbundvorhaben auf dem Gebiet der Entwicklung und Bewertung neuer Wärmedämmschichten und neuer Hochtemperaturwerkstoffe für Dampfkraftwerke.

Auf dem Gebiet der Membranentwicklung konnten erfolgreich Projekte eingeworben werden. Im Rahmen der HGF Allianzausschreibung wurde in der ersten Runde das Vorhaben MEM-BRAIN mit einem Finanzvolumen von 12 Mio. Euro Förderung über 3 Jahre Laufzeit bewilligt. Ebenso wurde das Projekt METPORE bewilligt, mit dem Ziel in Zusammenarbeit mit der Uni Queensland, Australien, mikroporöse Membranen auf porösen metallischen Trägern zu entwickeln. Das beantragte Vorhaben MEM-OXYCOAL hat zum Ziel, mischleitende Membransysteme für den Einsatz unter Oxycoalbedingungen zu entwickeln. Mit dem bewilligten Verbundvorhaben "HotVegas" durch BMWi wird zusammen mit universitären Kooperationspartnern eine neue zukunftsweisende Vergasungstechnologie entwickelt.

## **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

Die Durchführung des Additional - Funding - Projekts "CO<sub>2</sub>-Abtrennung" erfolgt in enger Zusammenarbeit der Teilinstitute IEF-1/-2/-3 sowie der Systemanalysegruppe IEF-STE. Unterstützt werden diese Arbeiten durch die Zentralabteilungen ZAT und ZCH.

Der Schwerpunkt der Arbeiten liegt auf dem Gebiet der Membranentwicklung, der Werkstoffcharakterisierung sowie der Prozesssimulation zur Identifizierung geeigneter Kraftwerksprozesse und kritischer Komponenten in denjenigen Kraftwerksbereichen, die das Membranmodul und dessen verfahrenstechnische Umgebung umfassen, mit dem Ziel das anfallende CO<sub>2</sub> in der erforderlichen Reinheit effizient abzutrennen. Darüber hinaus erfolgen Effizienzrechnungen der Membranverfahren für die verschiedenen Kraftwerksvarianten und ein Vergleich mit konkurrierenden konventionellen Abtrennverfahren sowie systemanalytische Betrachtungen.

Im Jahr 2007 wurden nach dem bereits laufenden BMWi Projekt OXYMEM, das sich mit der Entwicklung von dichten mischleitenden Membranen befasst und mit der Firma Siemens bearbeitet wird, zwei weitere Drittmittelprojekte gestartet. Im METPORE Projekt werden gemeinsam mit der University of Queensland und zahlreichen Industriepartnern (atech innovations, RWE, E.ON, EnBW) metallgestützte mikroporöse keramische Membranen entwickelt, die die H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> und N<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> Trennung im fossilen Kraftwerk realisieren sollen. Die HGF-Allianz MEM-BRAIN mit 11 wissenschaftlichen und 4 industriellen Partnern befasst sich mit der Entwicklung von verschiedenen Gasseparationsmembranen für Anwendungen in fossilen Kraftwerken und wurde Ende 2007 gestartet. MEM-BRAIN hat ein Gesamtvolumen von 22 Mio. €, von denen die Forschungseinrichtungen 50% selbst tragen.

Für die Aufgabe der Sauerstoffabtrennung aus Luft wurde am FZJ eine verfahrenstechnische Lösung zum Betreiben einer mischleitenden Membran bei 800°C entwickelt und zum Patent angemeldet. Die Permeationsraten potenzieller Werkstoffe wurden an Bulk-Proben (d=0,5 mm) bestimmt und liegen unter Berücksichtigung der Bedingungen des FZJ-Verfahrens je nach Werkstoff zwischen 0,1 und 3,2 ml/(cm<sup>2</sup>min). Ziel der Entwicklung sind ca. 30 µm dicke Dünnschichtmembranen mit einer zusätzlich aktivierten Oberfläche, um die Sauerstoffaufnahme und -permeation zu steigern und somit den Flächen- sowie den Massenbedarf der Membran zu verringern. Gleichzeitig werden die Werkstoffe umfassend thermo-chemisch und thermo-mechanisch charakterisiert, um Effekte aufzuzeigen (z.B. Alterung, Kriechen), die die geforderte Lebensdauer von 40.000 h gefährden könnten.

Für die Trennung von H<sub>2</sub> und CO<sub>2</sub> bzw. CO<sub>2</sub> und N<sub>2</sub> wurden mikroporöse Membranschichten aus TiO<sub>2</sub> und ZrO<sub>2</sub> entwickelt. Diese besitzen Porengrößen unter einem Nanometer und werden sowohl auf konventionellen Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Substraten als auch auf neuartigen metallischen Substraten abgeschieden. Der Aufbau der Membranen ist gradiert. Aufgabe der zukünftigen Entwicklung ist, Fehler in der Membranschicht zu vermeiden um die Trennraten zu erhöhen und die Poren so zu verändern, dass der Durchfluss erhöht werden kann. Außerdem wurden mittels einer Feststoffreaktion dünne protonenleitende (bei 500-800°C) Schichten hergestellt und charakterisiert. Das Ziel der weiteren Membranentwicklung besteht darin, mischleitende Werkstoffe zu entwickeln, die gegenüber CO<sub>2</sub>-Atmosphären stabil sind.

Begleitend zu den Entwicklungsarbeiten von Membranen werden die CCS-Technologien systemanalytisch untersucht. Dazu wurde für das BMBF eine "Kurzanalyse ausgewählter Studien zu CO<sub>2</sub>-Abscheidung, -Transport und -Speicherung" erstellt, in der der Stand der Technik, Defizite sowie Lösungsansätze und Forschungsprogramme zusammengefasst werden. Aufbauend auf den bisherigen Arbeiten wurden die Untersuchungen zum Life Cycle Assessment von Kraftwerken mit nachgeschalteter MEA-Wäsche gegenüber Kraftwerken ohne Abscheidung abgeschlossen. In einem vom BMWi geförderten Projekt zur "Sozioökonomische Begleitforschung zur gesellschaftlichen Akzeptanz von Carbon Capture and Storage (CCS) auf nationaler und internationaler Ebene" wurden Gefahrenpotenzial sowie die Risikowahrnehmung in der Bevölkerung analysiert.

## **Weitere Programmentwicklung**

### **Brennstoffzellen**

Die detaillierte Analyse von Degradationsmechanismen wird weiterhin einen Schwerpunkt am FZJ darstellen (siehe unten). Hinzu kommt die Erarbeitung erweiterter Kompetenzen hinsichtlich der Diagnostik von Stacks, von Methoden der Qualitätssicherung und beschleunigter Prüfverfahren. Die Erfüllung der Anforderungen

des automobilen Einsatzes der von BMW und FZJ gemeinsam entwickelten Leichtbau-SOFC-Stacks im CSII-Design bleibt ein weiterer Schwerpunkt, der bei der Erstellung des HGF-Programmes noch nicht absehbar war. In 2008 ist ein Meilenstein zur Kostenreduktion vorgesehen, der durch die Ausweitung der Produktionstechniken (roller coating) und die Standardisierung des Foliengießens vorbereitet wird.

Die FuE-Arbeiten zur Ertüchtigung eines DMFC-Systems für den dynamischen Kommissioniereinsatz gehen in Kooperation mit einem Industriekonsortium weiter. Schwerpunkte der Entwicklungen sind Steigerung der Leistungsfähigkeit, Verbesserung der Lebensdauer und Reduzierung der Kosten.

Bis zur Realisierung erster HT-PEFC-Leistungsstacks bedarf es noch grundlegender Entwicklungen an allen Zellkomponenten. Mit zielgerichteten Testprozeduren an eigenen Zellen und Stacks sowie an Stacks externer Anbieter werden die Ansätze für die notwendigen Innovationen erarbeitet.

Mit dem "Brass-Board System" verfügt das FZJ über ein universelles Testfeld für die Hauptkomponenten eines HT-PEFC-Systems. Die Komponenten werden einzeln und im Verbund eingehend untersucht, um die Testergebnisse für die Weiterentwicklung der Komponenten und der Systemkonfiguration zu nutzen.

Der NTBZ-Meilenstein 2008 sieht vor, leistungs- und kostenoptimierte DMFC/PEFC-Stacks mit insitu-abgeschiedenem Katalysator zu demonstrieren. Weltweit werden die besten Leistungs- und Alterungsergebnisse mit Elektroden erzielt, die mittels exsitu-Beschichtungsverfahren hergestellt wurden, so dass sich die Entwicklungen auf die Verbesserung dieser Verfahren konzentriert haben. Durch die Umsetzung der Senatsempfehlung von 2005 wurden die Arbeiten an PEFC-Stacks zugunsten neuer Aktivitäten zur Entwicklung von HT-PEFCs vorzeitig abgeschlossen. Aufgrund prinzipbedingter Grenzen der Leistungsfähigkeit von HT-PEFCs sind die Leistungsvorgaben eine PEFC in der Systemumgebung einer HT-PEFC nicht anwendbar.

### Strategische Weiterentwicklung

Im Bereich der SOFC sind drei Themen identifiziert worden, die in der strategischen Planung für die nächsten 15 Jahre (bis 2020) das FE-Programm strukturieren. Sie zielen auf die effiziente, damit emissionsarme und dezentrale Bereitstellung von Strom unter Nutzung verschiedenster Brenngase.

Verständnis der Degradationsmechanismen:

Deutschland- und europaweit soll eine Führungsposition mit Alleinstellungsmerkmal aufgebaut werden. Sie nutzt die weit fortgeschrittene Analytik, die profunde Erfahrung und die breit aufgestellte Expertise des FZJ, um das wissenschaftliche Verständnis der Degradationsmechanismen aus Sicht der Werkstoff- und Verfahrenstechnik weiter zu entwickeln und Effekte sowohl gezielt und effizient analysieren, als auch modellieren, vorhersagen und letztendlich vermeiden zu können. Insbesondere gehören zu diesem Gebiet die Modellbildung, sowie neue Analytikmethoden, inkl. in-situ- und zerstörungsfreier Verfahren, die auch zur Diagnostik im Betrieb genutzt werden können.

Robustes und reproduzierbar herstellbares Stack-Design:

Stacks für den eigenen Forschungsbetrieb und die Integration in Systeme müssen reproduzierbar und qualitätsgesichert hergestellt werden können. Dazu sind einerseits die Materialentwicklung für verlässliche und hochleistungsfähige Komponenten notwendig, und auf der anderen Seite neue Füge-, Fertigungs- und Montagetechniken, die Verfahrensentwicklung für die automatisierte Fertigung, sowie an diese Ziele adaptierte Designs. Ziel sind hoch entwickelte Komponenten mit hohen Herstell-Ausbeuten und zuverlässiger Leistungsfähigkeit unter anspruchsvollen Betriebsbedingungen.

Systeme zur Stromerzeugung (Aufwuchsthema):

Die SOFC-Technik ist durch ihre Brennstoff-Flexibilität und hohe Effizienz für den Einsatz in der industriellen KWK, in der Polygeneration und in der dezentralen Stromerzeugung bis zum MW-Maßstab prädestiniert. Hierbei ist die planare Technik in Deutschland bisher nicht vertreten. Die Qualifizierung dieser Technologie für die Anwendung im Bereich einiger 100 kW bedeutet ein Alleinstellungsmerkmal. Ziele sind die Entwicklung von Komponenten und Verständnis für das ‚upscaling‘, sowie neue Designs, die den erhöhten Anforderungen an Werkstoffe (Langlebigkeit) und den thermischen Belastungen standhalten. Die Gewichtung der Themen beträgt etwa 40%:45%:15% (Aufwuchs auf 25%), respektive.

## Werkstoffsysteme für die Kraftwerkstechnik

Im Bereich der Wärmedämmschichten steht die Entwicklung neuer Systeme mit deutlich höherer Temperaturbeständigkeit sowie von Systemen mit sensorischen Eigenschaften im Vordergrund. Sensoreigenschaften ermöglichen die volle Nutzung des Potentials der Schichten, so dass bei lokalem Versagen die Leistung und damit die Temperatur abgesenkt werden kann, ohne den Grundwerkstoff zu zerstören. Die für die Lebensdauermodellierung erforderlichen physikalisch - mechanischen Daten des Systems müssen ermittelt werden und in Lebensdauermodelle implementiert werden.

Die Untersuchungen an ferritisch-martensitischen Stählen werden abgeschlossen, da das Potential dieser Werkstoffklasse für zukünftige Kraftwerkskonzepte mit höheren Wirkungsgraden erschöpft ist. Lavesphasenverstärkte ferritische Stähle bieten ein deutlich höheres Potential, Betriebstemperaturen > 600 °C zu realisieren. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die Konstitution, Wärmebehandlung, mechanischen Eigenschaften, insbesondere Zeitstandverhalten und Hochtemperaturkorrosion in dampfhaltigen Atmosphären.

Die Arbeiten zum Korrosionsverhalten von Hochtemperaturkorrosionsverhalten in Oxyfuelatmosphären werden fortgesetzt, um Ende 2008 erste Empfehlungen für den Bau und die Betriebsweise von Pilotanlagen zu geben.

Im Fokus der Membranentwicklung steht die Identifizierung neuer Materialien mit hoher Permeabilität, Selektivität und Stabilität in Kraftwerksatmosphären. Für nanoporöse Membransysteme sind Porendurchmesser < 0,5 nm anzustreben, um die Selektivität deutlich zu erhöhen. Neue Protonenleiterzusammensetzungen wurden identifiziert und sollen nun synthetisiert und umfassend charakterisiert werden.

Systemanalysen zur Optimierung der Membranintegration in verschiedene Kraftwerkskonzepte und Stromversorgungsszenarien ergänzen die Membranentwicklungsarbeiten.

---

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Fusion

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 1 Energie
- **1.3 Fusion**
- 1.3.1 Stellaratorforschung
- 1.3.2 Tokamakphysik - ITER und danach
- 1.3.3 Fusionstechnologie für ITER
- 1.3.4 Fusionstechnologie nach ITER
- 1.3.5 Plasma-Wand-Wechselwirkung
- 1.3.6 Plasmatheorie

**Beteiligte Institute:** [IEF](#), [ZAT](#), [ZEL](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Ulrich Samm, IEF, [u.samm@fz-juelich.de](mailto:u.samm@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
- 

## Highlight

### Kontrolle des Randschichttransports durch Resonante Magnetische Störfelder

Am Europäischen Fusionsexperiment JET wurde unter Jülicher Federführung gezeigt, dass der Einsatz resonanter magnetischer Störfelder zur Vermeidung kritischer Wandbelastungen infolge von Instabilitäten am Plasmarand (sog. "Edge Localised Modes - ELMs") eine vielversprechende Methode für das Fusionsexperiment ITER ist. Hierbei konnten mit Hilfe externer Störfeldspulen transiente Teilchen- und Wärmeflüsse auf die hochbelasteten Wand-komponenten drastisch reduziert werden. Diese transienten Wärmeflüsse stellen in zukünftigen Fusionsreaktoren ein hohes Risiko für die Lebensdauer der ersten Wand und damit für die Verfügbarkeit des Reaktors dar.

Weitergehende Untersuchungen zum grundlegenden Verständnis des Plasmatransports unter dem Einfluss von Störfeldern werden am Jülicher Fusionsexperiment TEXTOR durchgeführt und durch gemeinsame Experimente zur Erforschung dieses Verfahrens zusammen mit Forschern am US-amerikanischen Fusionsexperiment DIII-D ergänzt.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Die Fusionsforschung in Deutschland - d.h. innerhalb der HGF - und weltweit verfolgt das langfristige Ziel, den Prozess der Energiegewinnung durch Kernverschmelzung nach dem Vorbild der Sonne auf der Erde nachzuvollziehen, um so der Menschheit eine ergiebige Energiequelle mit günstigen Sicherheits- und Umwelteigenschaften zu erschließen. Fusionsenergie könnte ab Mitte des Jahrhunderts in großtechnischem Maßstab zur Erzeugung von Grundlaststrom beitragen.

Mit der Bauentscheidung für ITER im südfranzösischen Cadarache wird die weltweit koordinierte Kernfusionsforschung ein erstes brennendes Fusionsplasma mit 500 MW Leistung, acht Minuten Brenndauer und zehnfacher Leistungsverstärkung realisieren. Das ITER-Experiment wird zusammen mit Ergebnissen aus dem Forschungsbegleitprogramm (Materialentwicklung, Fusionstechnologie, fortgeschrittene Plasmaphysik) für die Konstruktion des ersten für den Dauerbetrieb vorgesehenen Fusionskraftwerks DEMO entscheidend sein.

Das Stellarator-Konzept wird wegen seines spezifischen Dauerbetriebspotenzials als attraktive in Frage kommende Alternative zum Tokamak angesehen. Der derzeit im Bau befindliche optimierte Stellarator Wendelstein 7-X in Greifswald soll dazu dienen, die grundsätzliche Eignung dieses Konzepts zu erforschen.

Das Forschungsprogramm der Helmholtz-Gemeinschaft ist auf das europäische Fusionsforschungsprogramm ausgerichtet. Beteiligt an diesem Programm sind die Helmholtz-Zentren Max-Planck-Institut für Plasmaphysik (IPP), Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) und Forschungszentrum Jülich (FZJ). Das Forschungszentrum Jülich ist beim Thema Plasma-Wand-Wechselwirkung federführend und beteiligt sich, bis auf den Bereich Fusionstechnologie nach ITER, an allen anderen Themen.

Das Programm "Kernfusion" ist Teil des Forschungsbereichs "Energie" der HGF. Mit den anderen drei Programmen ist es durch das gleiche Ziel - die künftige Energieversorgung nachhaltig zu sichern - verbunden.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### 1. Stellaratorforschung

Die Komponentenfertigung für WENDELSTEIN 7-X hat auch in 2007 wesentliche Fortschritte zu verzeichnen. Die ersten beiden Halbmodule (in den Montageständen Ia & Ib) nähern sich plangemäß der Fertigstellung und sollen im März 2008 in den nächsten Montagestand umziehen, so dass dann die Arbeiten an den nächsten beiden Halbmodulen begonnen werden können. Der Jülicher Beitrag konzentriert sich dabei auf das supraleitende Bussystem und die Plasmadiagnostik.

##### Supraleitendes Bussystem

Das Supraleitende Bussystem, dessen Abstützungen und die zugehörigen Verbindungselemente (Joints) werden in Jülich entwickelt und gefertigt. Nach dem Aufbau der Fertigungsstraße und der Qualifizierung des Fertigungs- und Prüfprozesses für die Busleiter wurden alle Busleiter für das erste Modul gefertigt, erfolgreich getestet und versandt.

Unter Einbeziehung neuer Lastdaten wurden die Stützelemente für ein Modul iterativ ausgelegt und strukturmechanisch analysiert. Die Konstruktion der Stützelemente für das erste Modul ist abgeschlossen. Die Fertigung läuft.

Die Serienfertigung für die Joints wurde optimiert und läuft. Eine Schweißprozedur für mehrmalige Remontierbarkeit wurde entwickelt und getestet.

##### Plasmadiagnostik

Die Entwicklung und der Aufbau der Start-up Diagnostiken schreiten weiter planmäßig voran. Der vorbereitende Testbetrieb des HEXOS-Spektrometers für W7-X an TEXTOR wurde in 2007 fortgesetzt. Zahlreiche Spektrallinien von Plasma-Verunreinigungen wurden identifiziert und erste Experimente zum Verunreinigungstransport durchgeführt. Eine Absolutkalibrierung erlaubt nun die Bestimmung absoluter Verunreinigungsdichten aus den gemessenen Linienintensitäten.

Die Entwicklung eines Mehrkanal-Dispersionsinterferometers an TEXTOR als Test für einen späteren Einsatz an W7-X wurde weitergeführt. In 2007 wurde eine Real-Time-Auswertung der Messwerte für die Dichtregelung des Plasmas erfolgreich getestet und die Konstruktion der in-vessel Komponenten einschließlich hochpräziser Retro-Reflektoren für den Einsatz im Plasmagefäß vorangetrieben.

#### 2. Tokamakphysik - ITER und danach

Dieses Thema umfasst die experimentellen Arbeiten an TEXTOR und anderen Tokamaks wie JET und ASDEX Upgrade.

### Aktive Kontrolle von Edge Localized Modes (ELMs)

Unter Mitwirkung von FZJ wurden die Experimente zur ELM-Unterdrückung an JET durch Externe Störfeldspulen (Error Field Correction Coils) erfolgreich weitergeführt. Die Plasmabedingungen, in denen die durch ELMs hervorgerufenen transienten Wärmelasten durch ein externes  $n=1$  Störfeld deutlich reduziert werden, konnten zu ITER-ähnlicher Plasmastößigkeit, Plasmaform ("triangularity") und zu höherem Plasmadruck hin ausgeweitet werden. Darüber hinaus konnten erfolgreich erste Experimente mit reduzierter ELM-Amplitude mit der toroidalen Modenzahl  $n=2$  für das externe Störfeld durchgeführt werden.

An TEXTOR wurde festgestellt, dass externe resonante magnetische Störfelder mit toroidalen Modenzahlen  $n=1$  und  $n=2$ , die durch den Dynamischen Ergodischen Divertor (DED) erzeugt werden, in Limiter H-mode Entladungen im Gegensatz zu den Ergebnissen bei JET zu einer Absenkung der Randschichttemperatur und Erhöhung der Randschichtdichte führen. Mit der damit verbundenen Erhöhung der Plasmastößigkeit nimmt die Intensität der ELMs ab, wobei aber gleichzeitig der Transport zunimmt und die Transportbarriere am Rand sukzessive verloren geht.

### Disruptionsvermeidung und -abschwächung

Bei Untersuchungen zur Abschwächung der Folgen einer Disruption durch massive Gasinjektion an TEXTOR galt besonderes Augenmerk der Erzeugung und Unterdrückung von Runaway-Elektronen. Hierzu wurden weitere Gase wie Xe und Kr sowie der Einfluss externer Störfelder untersucht. Es konnte gezeigt werden, dass bei ausreichend großen DED-Störfeldern die Erzeugung von Runaway-Elektronen während einer Disruption verhindert werden kann. Das ultraschnelle Ventil wurde am FZJ insbesondere mit Hinblick auf die für ITER relevante Gasmenge weiterentwickelt. Tests des Prototyps werden 2008 durchgeführt. In Vorbereitung der Experimente mit dem schnellen Ventil an JET wurde die Wahrscheinlichkeit für die Erzeugung von Runaway-Elektronen in JET Disruptionen analysiert. Diese nimmt mit toroidalem elektrischem und magnetischem Feld stark zu. Eine Korrelation mit der Freisetzung von Verunreinigungen konnte gezeigt werden.

### Untersuchungen zur Stochastisierung von Feldlinien

Am Tokamak TEXTOR wurde mit Hilfe des Dynamischen Ergodischen Divertors (DED) die grundlegenden Untersuchungen zum Transport unter dem Einfluss resonanter magnetischer Störfelder fortgeführt. Die Bedeutung der Verbindungslängen der gestörten Feldlinien zum Divertor konnte am Beispiel eines Plasmaszenarios mit verbessertem Teilcheneinschluss gezeigt werden. Hierbei spielt die Modifikation des radialen elektrischen Feldes durch die resonanten magnetischen Störfelder eine besondere Rolle, die auf der Basis erhöhter Elektronenverluste und in ihrer Auswirkung auf die Plasmarotation erklärt werden konnte. Untersuchungen zur Funktionalität der helikalen Divertorstruktur des DED zeigten die Abhängigkeit des Rückhaltevermögens für Verunreinigungen von der Breite der gestörten Zone mit kurzen Verbindungslängen zum Target ("laminare Zone"). Das von außen aufgeprägte zusätzliche Magnetfeld des DED führt zu charakteristischen Mustern der Wärmebelastung auf den Divertorkacheln. Nimmt man an, dass das Plasma genau dem Magnetfeld folgt, dann kann man aus diesen Mustern schließen, bis wie weit in das Plasma hinein die Ergodisierung des Feldes wirkt. Die durchgeführten Modellrechnungen sind in der Tat konsistent mit diesen Annahmen und bedeuten ein wichtiges Resultat auch für die Charakterisierung resonanter magnetischer Störungen und deren mögliche Abschirmung in Experimenten am US-amerikanischen Tokamak DIII-D und an JET, an denen Wissenschaftler des FZJ beteiligt sind. In diesen Experimenten zur Charakterisierung der helikalen Divertorstruktur des DED sind umfangreiche Daten zur Validierung 3-dimensionaler Transportmodelle wie EMC3-Eirene gewonnen worden.

## **3. Fusionstechnologie für ITER**

### Materialien für plasmaberührende Komponenten in ITER

Für diverse mehrdirektional-verstärkte Kohlefaser-Verbundwerkstoffe (NB31, N31 der Fa. SNECMA sowie 3-direktionales CFC der Fa. Dunlop) wurde die Zugfestigkeit in allen drei Raumrichtungen ermittelt. Zusätzlich wurden die thermo-physikalischen Eigenschaftskennwerte (Temperaturleitfähigkeit, spezifische Wärme, Dichte) bestimmt. Die Betriebsgenehmigung für die Elektronenstrahlanlage JUDITH 2 wurde erteilt. Damit kann das Ermüdungsverhalten von größeren, aktiv gekühlten Bauelementen mit ITER-spezifischen Wärmeflüssen  $> 10 \text{ MWm}^{-2}$  realitätsnah untersucht werden; insbes. Wolfram-armierte Divertormodule. Systematische Experimente zum Thermoermüdungsverhalten wurden an diversen Divertormodulen mit unterschiedlichen Geometrien und Verbindungstechniken unter Hypervapotron-Kühlung durchgeführt. In

Zusammenarbeit mit dem FZK wurden heliumgekühlte Bauelemente für den Divertor von DEMO zur Detektion thermisch induzierter Materialschädigungen und Klärung der Schädigungsmechanismen metallographisch charakterisiert. Ein Prototyp des lamellaren Wolframdivertors für die ITER-ähnliche Wand in JET wurde unter den zu erwartenden Wärmeflüssen von bis zu 9 MWm<sup>-2</sup> in JUDITH 2 getestet. Zur Bewertung und Quantifizierung des Neutroneneinflusses auf die Thermoschockresistenz von Wandmaterialien wurden zahlreiche Werkstoffkandidaten für die erste Wand und den Divertor von ITER (W, C und Be; Variation von Korngröße, Kornform, Faserverstärkung) in Materialtestreaktoren (HFR-Petten, BR-2 Mol) mit ITER-relevanten Dosen bestrahlt. Anschließend wurden in der Elektronenstrahlanlage JUDITH 1 die bei Disruptionsstörfällen und ELM-artigen Belastungen zu erwartenden Belastungen mit thermoschockartigen Pulsen (im MJm<sup>-2</sup>-Bereich; 1-5 msec) simuliert.

#### Entwicklung von ITER-Diagnostik und -Portplugs

Von dem von FZJ geführten Konsortium wurde ein erstes Konzept-Design für das ITER-CXRS-Diagnostiksystem entwickelt. Hierauf aufbauend wurde eine erste Fassung des detaillierten Projektplans zur Realisierung des Systems einschließlich detaillierter Systembeschreibung, Zeitplan und Kostenschätzung (Personalaufwand ca. 200 Mannjahre, Investitionen ca. 20 M€) erstellt. Begleitend wurden vergleichende Studien zur Entwicklung eines Prototyp-Spektrometers sowie Neutronenberechnungen zur Ermittlung der Belastung kritischer Bauteile im Port-Plug durchgeführt. Vergleichende Tests verschiedener Spiegelmaterialien an TEXTOR ergaben als Zwischenergebnis einkristallines Molybdän als die wahrscheinlich haltbarste Lösung bei erosionsdominierten Verhältnissen. Für die Lebensdauer des ersten Spiegels werden als Arbeitshypothese derzeit 4 bis 12 Monate angesetzt. Die Ergebnisse der Spiegeluntersuchungen sind relevant für alle optischen Diagnostiken an ITER, deren dem Plasma zugewandte erste Spiegel durch den Teilchenfluss vom Plasma her der Erosion und/oder Deposition ausgesetzt sind. Erste Konzeptentwicklungen für einen beweglichen und gekühlten Shutter zum Schutz des ersten Spiegels vor Erosion und Deposition sowie zur Entwicklung eines herausziehbaren Rohrsystems im Port-Plug für den Austausch des ersten Spiegels wurden durchgeführt.

#### **4. Plasma-Wand-Wechselwirkung**

Die Beherrschung der PWW hat eine zunehmende Bedeutung für den Operationsbereich von ITER und die Entwicklung eines stationär laufenden Fusionsreaktors. Die PWW Forschung gehört zu den zentralen Aufgaben im europäischen Fusionsforschungsprogramm. Primäres Ziel ist es, Bedingungen mit niedriger Erosion, d.h. langer Lebensdauer der Wandkomponenten, und minimaler Brennstoffrückhaltung zu erreichen, die gleichzeitig mit den Anforderungen an den Energieeinschluss in ITER kompatibel sind. Dies ist stark durch die Wahl der Wandmaterialien bestimmt, für die zunächst eine Kombination aus Kohlenstoff, Beryllium und Wolfram vorgesehen ist. Für die experimentellen Arbeiten standen vornehmlich die Tokamaks JET, TEXTOR und ASDEX Upgrade zur Verfügung sowie diverse andere Anlagen in der HGF und bei internationalen Partnern.

#### Experimente zu Erosion, Deposition, Kohlenstoffmigration und Brennstoffrückhaltung

In TEXTOR wurde das Transportverhalten von höheren Kohlenwasserstoffen in der Nähe von Limiteroberflächen untersucht und mit Modellvorhersagen verglichen. Die lokale Redepositionswahrscheinlichkeit ist ähnlich wie bei Methan. Die lokale Redeposition von Kohlenstoff nach Einblasen von Methan ist auf W Oberflächen deutlich geringer gegenüber Kohlenstoffoberflächen. Es zeigt sich weiterhin, dass die Oberflächenrauigkeit ein wichtiger Parameter ist.

In JET wurden Untersuchungen zur Einlagerung von Brennstoff in deponierten Kohlenstoffschichten mit Hilfe der speziell entwickelten Depositionsdetektoren (QMB) fortgeführt. Die deponierte Materialmenge im Schattenbereich des inneren Divertors wird im wesentlichen durch ELMS hervorgerufen und ist exponentiell von der ELM Energie abhängig. Oberflächen in der "private flux region" können sowohl erosions- wie depositionsdominiert sein, abhängig davon, ob der innere Plasmafußpunkt auf dem vertikalen Target (Deposition) oder auf dem Divertorboden (Erosion) auftrifft.

Die abgestrahlte Energie aus dem Plasma während Disruptionen und Randschichtinstabilitäten (ELMs) wurde mittels hochauflösender Bolometrie in JET untersucht. Nach ELMs zeigt sich eine deutlich erhöhte Strahlung, wobei die Strahlung ab einer bestimmten Schwellenergie überproportional zunimmt. Die wird auf die Verdampfung von redeponierten Kohlenstoffschichten zurückgeführt.

Die Abnahme der chemischen Erosion mit zunehmenden Teilchenfluss wurde in der linearen Plasmaanlage Pilot-PSI (FOM) mit sehr hohen Teilchenflüssen bestätigt.

Zur Entfernung deponierter Kohlenwasserstoffschichten auf der Basis von ICRH Reinigungsentladungen bei anstehendem Magnetfeld wurden reaktive Plasmen in H<sub>2</sub>, und N<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> Gemischen eingesetzt. Es zeigt sich, dass die Überlagerung vertikaler Magnetfelder Homogenität und Effektivität der Wandreinigung deutlich verbessern.

#### Hoch-Z-Wandmaterialien und gemischte Materialsysteme

Untersuchungen zum Schmelzverhalten von W-Brush-Limitern in TEXTOR zeigten, dass die gefürchtete Brückenbildung zwischen den einzelnen Segmenten durch geschmolzenes Wolfram auch hier wieder nicht auftrat. Die Emission von verschiedenen neutralen Wolfram Linien wurde in TEXTOR und in dem Plasmasimulator PSI-2 bestimmt und mit Modellrechnungen verglichen. Kastellierte Wolframoberflächen zeigen innerhalb der Schlitze eine deutliche Vermischung der deponierten Kohlenstoffschichten mit Wolfram.

Die Arbeiten zur Qualifizierung der massiven W-Kacheln für den Einsatz in JET wurden abgeschlossen. Die industrielle Fertigung wurde im Herbst 2007 gestartet und wird kontinuierlich vom FZJ Team begleitet. Die industriellen Technologien zur Beschichtung von CFC mit Wolfram wurden an dem Wärmeflusssteststand GLADIS am IPP geprüft. Dabei wurden 200 µm W VPS-Schichten und 20 µm PVD W/Re Multilayer für die Test ausgewählt. Die Haltbarkeit der Schichten wird durch den Unterschied der thermischen Ausdehnung von W und CFC und damit durch die Oberflächentemperatur des Wolframs bestimmt.

#### Wärmeabfuhr bei transienten Belastungen

Zur Untersuchung des Werkstoffverhaltens bei zyklischer ELM-artiger transienter Belastung führt das FZJ in Zusammenarbeit mit TRINITI (Troitsk), KIPT (Kharkov) und SNLA (Albuquerque) Belastungstests an CFC und Wolframproben durch. Trotz der sehr unterschiedlichen Belastungsszenarien in den einzelnen Testanlagen lassen sich die Schwellwerte für die resultierenden Werkstoffschädigungen (Rissbildung, Phasenumwandlungs- und Erosionsprozesse) mit Hilfe eines Wärmeflussfaktors quantitativ beschreiben.

Thermozyklierversuche an wassergekühlten Wolframtargets mit einem gerasterten Elektronenstrahl zur Simulation ELM-ähnlicher Belastungen wurden mit bis zu 400.000 Einzelpulsen durchgeführt. In Teilbereichen zeigten sich intensive Rissbildungen mit einer Risstiefe von = 50 µm.

Berylliumcoatings auf unterschiedlichen Substraten (INCONEL, Nickel-Zwischenschichten bzw. auf monolithischem Beryllium) wurden im Elektronenstrahlversuch mit quasistationären Leistungsdichten von bis zu 4.5 MWm<sup>-2</sup> belastet. Diese Experimente bilden die Basis für vergleichbare Qualifikationstests an Beschichteten CFC und W-Substraten.

#### Modellierung

Der Monte Carlo Code ERO zur Berechnung von Erosions- und Depositionsprozessen wurde durch Zusammenführung der verschiedenen Versionen für Limiter, Divertor- und Linearmaschinen verallgemeinert und Verbesserungen durch die Beschreibung von Stößen zwischen Neutralteilchen sowie die Aktualisierung atomarer und molekularer Daten wurden angebracht. Der ERO Code wurde u.a. eingesetzt zur Begleitung der Be-Experimente an der linearen Anlage PISCES-B, für die Tritiumrückhaltung in ITER und die Bestimmung der Deposition in den Schlitzen kastellierter Oberflächen.

#### Diagnostik

Die Entwicklung zu Methoden der in-situ Bestimmung des Wasserstoffgehalts von Kohlenstoffschichten mittels Laserdesorption und lokaler Spektroskopie wurde in TEXTOR fortgeführt. Es konnte gezeigt werden, dass die Wasserstoffrückhaltung in Kohlenstofflimitern und in redeponierten Kohlenstofffilmen schussaufgelöst bestimmt werden kann. Eine Designstudie für den möglichen Einsatz eines solchen Systems in ITER wurde begonnen. Für das JET ILW-Projekt wurden neue spektroskopische Beobachtungssysteme für die Bestimmung der Wolframquellen im Divertor spezifiziert.

## 5. Theorie

### Randschichtphysik

Randschicht-Codes erlauben es, ausgehend von experimentellen Resultaten bei derzeit laufenden Divertor-Maschinen, Erwartungen für das Randschichtverhalten von ITER zu erarbeiten. Der geplante ITER-Divertor basiert zum Großteil auf entsprechenden Simulationsrechnungen. Um deren Verlässlichkeit sicher zu stellen, wurden systematische Vergleiche zwischen verschiedenen Codes sowie zwischen Codes und Experimenten begonnen, und zwar im Rahmen der ITPA DivSOL activity (DSOL-16) und als Teil der "EU Task Force on Integrated Tokamak Modelling". Im Jahr 2004 wurden erste Tests der Codes EDGE2D-NIMBUS und B2-EIRENE (SOLPS5) durchgeführt, die 2007 erweitert wurden. In diesem Zusammenhang wurde deutlich, dass diverse atomphysikalische Daten - wie sie für Randschichtrechnungen benötigt werden - einen erheblichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben können und deshalb möglichst genau bestimmt werden müssen.

Studien zur Reduzierung oder Entfernung der zentralen Divertorstruktur ("Dome") im Rahmen der Randschichtmodellierung ergaben, dass eine Reduktion vertretbar ist, während die Entfernung eine wesentliche Verschlechterung des Heliumpumpens zur Folge hätte. Die Simulationen zeigen auch, dass der Betrieb, in dem die Separatrix auf die vertikalen Prallplatten auftrifft, einem Betrieb mit Separatrix am Divertorboden vorzuziehen ist. Modellierungen mit Verunreinigungszugabe (Neon) zur Reduzierung der Divertorbeanspruchung haben begonnen und zu einer ersten Skalierung geführt.

In Zusammenarbeit mit ITER, INRS und Hydro-Québec wurde das ICPS-Modell weiterentwickelt, in dem die Modellierung von Haupt- und von Randschicht- und Divertorplasma verknüpft werden. Die Skalierungen aus der Randschichtmodellierung sind wesentlicher Bestandteil der Modellierung des Hauptplasmas. Diese Arbeiten führten zur Entwicklung eines Betriebsbereiches für ITER, der durch fünf Grenzwertkurven bestimmt ist. U.a. ergibt sich eine Begrenzung der Fusionsleistung durch Abfall der Ionentemperatur bei hoher Dichte sowie eine Begrenzung durch das Randdichtelimit (volle Ablösung des inneren Divertorplasmas von der Prallplatte), die den Zugang zu hoher Fusionsleistung und hohem Q einschränken. In weiteren Modellierungen wurden anhand dieses Betriebsdiagramms einige wichtige Fragen des ITER Design Reviews untersucht. So wurde gezeigt, dass bereits eine Reduzierung des Hauptmagnetfeldes um 5% eine wesentliche, und um 10% eine kaum akzeptable Reduzierung des Betriebsbereiches zur Folge hätte.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

#### Chancengleichheit

Der "Total E-Quality Award" würdigt die Anstrengungen des FZJ zur Herstellung von Chancengleichheit (Einstellungspolitik, Kinderbetreuung, Rückkehr-Unterstützung).

#### BMBF-Projektförderung

Das BMBF hat zur Ertüchtigung deutscher Forschungseinrichtungen und Unternehmen für die Akquisition von ITER-Aufträgen sowie zur Erfüllung der Verpflichtungen, die Deutschland im Rahmen des "Broader Approach" übernommen hat, ein Sonderprogramm im Rahmen der Projektförderung aufgelegt. Der "Broader Approach" ist ein Kooperationsabkommen zwischen Europa und Japan als Ausgleich für Japans Verzicht auf den ITER-Standort. U.a. wird dabei in Japan ein "Satelliten-Tokamak", d.h. eine ITER begleitende flexible Fusionsmaschine (JT60-SA), errichtet und die Planungs- und Validierungsphase für die "International Fusion Materials Irradiation Facility" (IFMIF) durchgeführt. IFMIF ist eine Neutronenquelle, die zur Qualifizierung von Materialien für Fusions-Leistungsreaktoren gebraucht werden wird. Der EU-Anteil Projekte wird größtenteils durch freiwillige Beiträge von Mitgliedsstaaten, darunter Deutschland, erbracht. Das FZK wird für die Magnetspulen des JT-60 SA die Hochtemperatur-Supraleiter-Stromzuführungen bereitstellen und auch zur IFMIF-Vorbereitung wesentliche Beiträge liefern, z.B. die Detailkonstruktion der kompletten Testzelle einschließlich des Hochflussmoduls. Hierbei sowie durch die geplanten ITER-Arbeiten soll fertigungstechnisches Know-how (weiter-)entwickelt und in deutsche Industriefirmen transferiert werden. Für 2007 wurden zunächst 5,5 Mio. bewilligt, die wie folgt eingesetzt wurden:

- FZJ 1,4 MEuro: Vorbereitende Arbeiten für die ITER-CXRS-Diagnostik, die ITER Tritium Retention Diagnostik sowie ein Disruption Mitigation Ventil für ITER.

- FZK 3,5 MEuro: Vorbereitende Arbeiten für die IFMIF-Testzelle sowie zur Fertigungstechnik für den ITER ECRH Upper Launcher.
- IPP 0,6 MEuro: Vorbereitende Arbeiten zum Teststand ELISE ("half-size" HF-Quelle für negative Ionen mit Extraktion).

### Konsortienbildung

Die Kooperationen mit den EURATOM-Assoziationen werden für die Errichtung von ITER auf eine neue Basis gestellt. Gegenwärtig formieren sich teilweise unter der Führung von FZJ, FZK und IPP europäische Konsortien von Assoziationen, um jeweils die Verantwortung für die Realisierung einzelner Systeme und Komponenten aus dem europäischen Auftragspaket für ITER zu übernehmen. Es handelt sich dabei um komplexe Gewerke im Wert von einigen 10 bis zu 100 MEuro, die jeweils das spezifische Know-how der Fusionslabors erfordern. Das FZJ bereitet gemeinsam mit ITER-NL ein Konsortium für die ITER-CXRS-Diagnostik vor.

## **Weitere Programmentwicklung**

Der ITER Design-Review wurde in 2007 weitgehend abgeschlossen und das neue "Baseline Design 2007" am 28.11. dem "ITER Council" übergeben. Unter intensiver Mitarbeit der deutschen Zentren ergaben sich über 80 "Design Change Requests". Entscheidungen zu den Vorschlägen des Design Reviews werden im Sommer 2008 erwartet.

Nach der Gründung der europäischen Domestic Agency für ITER in Barcelona wird nicht nur die ITER-Zuarbeit von diesem Joint Undertaking übernommen, sondern auch die Förderung der Fusions-Technologie. EFDA wird nach wie vor für JET verantwortlich sein und neue Aufgaben im Rahmen der Koordinierung der Physik und "emerging technologies" übernehmen.

In Folge einer Empfehlung des Ministerrates werden durch den im Jahr 2008 beginnenden "Facilities Review" in den europäischen Fusionsforschungseinrichtungen bestehende bzw. geplante fusionsorientierte Experimente und Einrichtungen evaluiert. Ein Gutachter-Panel bestehend aus außereuropäischen Fusionsexperten und europäischen Gutachtern, die nicht aus der Fusion stammen, ist bereits tätig. Die Ergebnisse dieser Evaluierung könnten eine sehr wichtige Rolle bei der zukünftigen Förderung der Assoziationen durch die EU im FP8 spielen.

Auf Initiative von IPP und FZJ wurde ein Antrag zur bevorzugten Förderung eines "High Performance Computers" mit mindestens 100 TFlop/s für die Fusion gestellt. Der Rechner wäre Teil des zur Zeit stattfindenden Ausbaus der Supercomputing Ressourcen am FZJ. Die Entscheidung über diesen Antrag wird im Laufe des Jahres 2008 erwartet.

Für das Jahr 2008 sind die wichtigsten vorgesehenen Meilensteine der fünf Programmthemen mit Jülicher Beteiligung nachfolgend stichpunktartig aufgeführt.

### Stellaratorforschung

- Supraleitendes Bussystem und Joints, Auslieferung der Joints und der Stützen, Halter und Klammern für das erste Modul, Auslieferung der Busleiter für das zweite Modul

### Tokamakphysik - ITER und danach

- Nutzung des Feedbacksystems an TEXTOR, basierend auf ECRH/ECCD Launcher und ECE Detektor mit derselben Sichtlinie in der 3/1 DED Konfiguration zur Anregung der klassischen 2/1 Mode
- Experimente zur Reduktion von ELMs mit externen Störfeldern in n=2 Konfiguration an JET, insbesondere mit Teilchennachfüllung durch Gaseinlass
- Disruption Mitigation, JET Experimente mit massiver Gasinjektion, Test und Inbetriebnahme des neuen schnellen Ventils mit großem Injektionsvolumen
- Charakterisierung des helikalen Divertors in TEXTOR bei hohen Plasmadichten, Vergleich mit Rechnungen mit dem 3- dim. Transportmodell EMC3-Eirene

- Untersuchungen zur Abschirmung des resonanten magnetischen Störfeldes und auf turbulenzgetriebene Plasmaströmungen am Tokamak TEXTOR
- Untersuchungen zur Bedeutung von Feldlinien mit kurzer Verbindungslänge zur ersten Wand für die Unterdrückung von ELMs in poloidaler Divertorkonfiguration unter dem Einfluss resonanter magnetischer Störfelder (gemeinsame Experimente unter Mitwirkung von FZJ am US amerikanischen Tokamak DIII-D)

#### Fusionstechnologie für ITER

- Untersuchungen zur Integrität Wolfram-armierter Divertorbauteile für JET, ITER, DEMO
- Untersuchung des Ermüdungsverhaltens aktiv gekühlter Bauteile mit Berylliumarmierung
- Qualifikationstests an prototypischen Wandmodulen für ITER
- "Collaboration agreement" und Gründung eines Konsortiums zwischen FZJ, ITER-NL und anderen europäischen Partnern zur Entwicklung des ITER CXRS Diagnostik-Systems.
- Aufbau eines Demonstrations-Experiments auf der Basis der Laser-Desorption zur Entwicklung einer ITER Tritium Retention Diagnostik

#### Plasma-Wand-Wechselwirkung

- Weiterentwicklung von Modellen zum globalen und lokalen Materialtransport und Vorhersagen für ITER und zukünftige Fusionsanlagen.
- Untersuchungen zur Rückhaltung von Brennstoff in Hoch Z Materialien ( W, Mo)
- Untersuchungen in TEXTOR zum Transport von Kohlenstoff auf W-Oberflächen und in strukturierten Wandkomponenten.
- Untersuchungen zur Verunreinigungsfreisetzung und des Strahlungsverhaltens unter ITER-relevanten Plasmabedingungen im Divertor. Quantifizierung des Einflusses von transienten Ereignissen am Kohlenstofftransport im JET Divertor. Weitere Untersuchungen in TEXTOR zum Transport von Kohlenstoff in strukturierten Wandkomponenten
- Fortsetzung der Untersuchungen zum Materialverhaltens bei ELM-artiger Belastung; Elektronenstrahlsimulation bei hohen Zyklenzahlen und Charakterisierung von verschiedenen Wolframqualitäten unter dem Einfluss intensiver transientser Belastungen

#### Plasmatheorie

- Detaillierte Verifikation des EMC3-EIRENE-Codes anhand von TEXTOR-DED- und DIII-D-Daten, sowie Weiterentwicklung im Hinblick auf die interpretative Anwendung auf den W7-X-Divertor
- Weiterentwicklung des Randschicht- / Divertormodells unter Einbeziehung realistischer Wandmodelle sowie nichtlinearer Neutralteilchenmodelle und Betrieb mit Verunreinigungszugabe

---

[+ Detailergebnisse](#)

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Nukleare Sicherheitsforschung

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 1 Energie
- **1.4 Nukleare Sicherheitsforschung**
- 1.4.1 Sicherheitsforschung für Kernreaktoren
- 1.4.2 Sicherheitsforschung für die Entsorgung nuklearer Abfälle

**Beteiligte Institute:** [IEF](#), [S](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Reinhard Odoj, IEF, [r.odoj@fz-juelich.de](mailto:r.odoj@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
- 

## Highlight

### Prompt-Gamma-Neutronen-Aktivierungs-Analyse zur Charakterisierung großvolumiger Objekte

Die Deklaration von potenziell wassergefährdenden Stoffen (z. B. Schwermetallen) in radioaktiven Abfällen ist durch das Genehmigungsverfahren für das Endlager Konrad notwendig geworden. Zur Ermittlung und Überprüfung dieses Inventars ist ein zerstörungsfreies Analyseverfahren auf Basis der Prompt-Gamma-Neutronen-Aktivierungs-Analyse (PGNAA) in Entwicklung. Das PGNAA-System besteht aus einem 14 MeV Neutronengenerator zur Neutronenbestrahlung des Messobjektes, einem Germanium-Detektor zum Nachweis der aus dem Messobjekt emittierten Prompt-Gammastrahlung und einer Graphitmesskammer als Neutronenreflektor bzw. -absorber.

Für die Auslegung und Optimierung des PGNAA-Systems wurden numerische Simulationen der Neutronen- und Gammatransportvorgänge in Messobjekten mit verschiedenen Zusammensetzungen mit dem Programm MCNP (Monte-Carlo-N-Particle) durchgeführt. Weiterhin wurden aus Strahlenschutzgründen die Neutronen- und Photonendosisleistungen an den angrenzenden Nachbarräumen des Experimentiertortes mit MCNP berechnet. Es wurde festgestellt, dass die Dosisleistungen deutlich unterhalb des von Gesetzgeber vorgeschriebenen Grenzwerts liegen werden.

Ein solches PGNAA-System zur Charakterisierung großvolumiger Objekte kann europaweit als Pionierarbeit betrachtet werden. Ein möglicher Spin-off dieser PGNAA-Entwicklung ist die Charakterisierung großer Stoffmengen aus dem konventionellen Bereich wie z. B. Elektroschrott, Klärschlamm, Abraummateriale der Rohstoffindustrie oder der Nachweis von Sprengstoffen in Gepäck- oder Fundstücken.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im Programm **Nukleare Sicherheitsforschung** hat sich die Forschungszentrum Jülich GmbH mit ihrem Institut für Energieforschung, IEF-6 (Sicherheitsforschung und Reaktortechnik) und dem Geschäftsbereich Sicherheit und Strahlenschutz (S) eingebracht. Generelles Ziel der Jülicher Arbeiten ist es,

Sicherheitskonzepte für Reaktoren und Entsorgungstechnologien zu entwickeln um kerntechnische Anlagen in Zukunft noch zuverlässiger und nachhaltiger zu machen.

Die Arbeiten des Programms Nukleare Sicherheitsforschung teilen sich auf in die 2 Programmthemen "Kernreaktoren (PT1)" und "Nukleare Entsorgung (PT2)".

Im Programmthema **Kernreaktoren** befasst sich das FZJ mit sicherheitsrelevanten Untersuchungen zur Reaktor- und Anlagenauslegung sowie mit Phänomenen und Prozessen bei Auslegungs- und auslegungsüberschreitenden Störfällen. Im Mittelpunkt stehen Weiterentwicklungen zu Fragen der Wasserstoffbeherrschung im LWR sowie Codes zur Beschreibung von Störfällen.

Die Arbeiten zum Programmthema **Nukleare Entsorgung** beinhalten Untersuchungen zur Reduzierung der Radiotoxizität (Partitioning und Transmutation) sowie Experimente zum Verhalten ausgewählter Spaltprodukte und Actiniden unter Neutronenbeschuss um deren Transmutationseigenschaften besser zu verstehen.

Weitere Themen sind Charakterisierung und Immobilisierung von radioaktiven Abfällen sowie Langzeitsicherheit bei der Endlagerung von bestrahlten Brennelementen aus Hochtemperatur- und aus Forschungsreaktoren. In der Strahlenschutzforschung werden anwendungsbezogene Themen zur Verbesserung von Dosimetrie, Messanalytik und radiologischer Bewertung bearbeitet.

Als Querschnittsaufgabe wurde das Thema " High Performance Computing und Validierung" neu aufgenommen. Hier sollen Zuarbeiten zu allen Programmthemen des Instituts geleistet, werden.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### PT1 (a) Reaktor- und Anlagenauslegung

##### Erstellung von Multigruppen-Datenbibliotheken:

Ausgelöst durch eine Unsicherheit bei der Berechnung der thermischen Neutronenstreuung nach dem Freigasmodell im Programm XLACS77 aus dem AMPX-77 System wurde die Winkelabhängigkeit der bei diesem Prozess gestreuten Neutronen genauer untersucht. Im Rahmen dieser Untersuchung wurde ein systematischer Vergleich der Processing Codes NJOY, XLACS77 (nach erfolgter Korrektur) und eines eigenen, zu diesem Zweck geschriebenen Programms durchgeführt. Hierbei stellte sich heraus, dass bei den integrierten P0 und P1 Koeffizienten der Streumatrizen Abweichungen von bis zu 9% bzw. bis zu 20 % zwischen dem Programm NJOY und den beiden anderen Programmen auftraten. Bei den P2 und P3 Koeffizienten waren die Differenzen sogar noch größer. Eine Erklärung für diese Abweichungen steht noch aus.

In der neuen Version des Programmsystems V.S.O.P. (Release 99/05) werden die thermischen Transportquerschnitte der 96-Gruppen THERMALIZATION-Library (2.05 - 10<sup>-5</sup> eV) für die Moderatormaterialien als Funktion der Moderatortemperatur unter Verwendung des mittleren Kosinus des Streuwinkels  $\bar{g}(T)$  berechnet. Für Graphit standen die  $\bar{g}(T)$  - Werte schon für 17 verschiedene Temperaturen - berechnet auf der Grundlage der neuesten ENDF/B-VII-Daten - zur Verfügung. Diese wurden nun ergänzt durch die mittleren Kosinus der Streuwinkel der restlichen Streuer der THERMALIZATION- bzw. THERMOS-Library. Diese Streuer sowie die zur Erzeugung der Gruppendaten benutzten Temperaturstützpunkte, die thermischen Streuamodelle und die jeweilige Datenbasis sind im Einzelnen:

- Be-9: 980 Kelvin, Kristallmodell, ENDF/B-VII
- Be-9: 1366 und 1422 Kelvin, Freigasmodell, JEF-1
- Be in BeO: 900 Kelvin, Kristallmodell, ENDF/B-VII
- BeO: 900 Kelvin, Kristallmodell, ENDF/B-VII
- H-1 in H<sub>2</sub>O: 293, 323, 373, 473, und 573 Kelvin, Kristallmodell, ENDF/B-VI
- H-2 in D<sub>2</sub>O: 293, 323, 373, 473 und 573 Kelvin, Kristallmodell, ENDF/B-VI
- O-16: 293, 323, 373, 473, 573, 900, 1200 und 1350 Kelvin, Freigasmodell, JEF-1.

## Berechnung der Neutronen- und Gamma-Leistungsdichteverteilungen im HTR:

Ein nicht zu vernachlässigender Anteil der bei der Kernspaltung oder auch bei anderen Kernreaktionen freiwerdenden Energie wird nicht sofort am Ort ihrer Entstehung deponiert sondern - nach einer Vielzahl von Wechselwirkungen - erst in weiterer Entfernung. Im Reaktordynamikprogramm TINTE wird dieser Effekt durch ein Verfahren behandelt, das in der Vergangenheit durch detaillierte gekoppelte Neutronen-Gamma-Transportrechnungen überprüft worden ist. Durch die Erweiterung des TINTE Programms zu dem Multigruppen-Code MGT und durch die Verwendung einer Mittelsäule in neueren Reaktorentwürfen wurde es erforderlich, das im Programm TINTE verwendete Verfahren zur Behandlung der nichtlokalen Wärmequellen zu überprüfen und den neuen Gegebenheiten anzupassen. Zu diesem Zweck wurde eine detaillierte Berechnung der Neutronen- und  $\gamma$ -Leistungsdichteverteilungen im Reaktorkern und in den äußeren Komponenten des Reaktors auf der Grundlage der Transporttheorie durchgeführt. Die erforderliche raum- und energieabhängige Quellverteilung der Spaltneutronen wird hierbei unter Verwendung der Ergebnisse aus der Coreauslegungsrechnung mit dem Programm V.S.O.P. bestimmt. Die Transportrechnungen werden in P3-S16 Näherung mit dem Programmsystem SCALE 5 durchgeführt. Die Zahl der Neutronengruppen beträgt 199, die der  $\gamma$ -Gruppen 42. Die verwendeten Neutronen- und  $\gamma$ -Wirkungsquerschnitte und KERMA-Faktoren werden der VITAMIN B-6 Library entnommen, wobei die  $\gamma$ -KERMA-Faktoren korrigiert werden mussten. Die so erhaltenen Informationen über die in den Komponenten des HTR deponierte Wärme werden in das neue Programm MGT transferiert.

### **PT1 (b) Auslegungs- und auslegungsübergreifende Störfälle**

Schwere Reaktorunfälle wie Three Mile Island (1979) und Tschernobyl (1986), bei denen durch Reaktion von Kühlmitteln mit Strukturmaterialien große Mengen brennbaren Wasserstoffs entsanden, haben zu intensiven Forschungsanstrengungen geführt, die Sicherheit der Reaktoren zu verbessern und speziell das Risiko von Wasserstofffreisetzungen im Störfall zu beherrschen. Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Wasserstoffbeherrschung dienen dem vertieften Verständnis von Prozessen in katalytischen Rekombinatoren und somit zur Verbesserung der Belastbarkeit von Störfallanalysen.

Die Rekombinatormodellierung REKO-DIREKT wurde um die Möglichkeit erweitert, instationäre Abläufe zu berechnen. Damit wird nun auch die für die Effektivität von Rekombinatoren wichtige Startphase abgebildet. Validierungsdaten für diesen Modellteil sollen in einer neuen Versuchsanlage REKO-4 ermittelt werden, die derzeit in Zusammenarbeit mit der RWTH Aachen im Wasserstofflabor des IEF-6 errichtet wird. Neue Betriebsdaten - u.a. zur Zündung an heißen Katalysatorblechen - wurden in Experimenten in der REKO-3-Anlage ermittelt.

Zur Modellierung und Abbildung lokaler Phänomene im Zusammenhang mit Störfallanalysen wurden Rechnungen mit der CFD-Software ANSYS-CFX durchgeführt. Durch Beiträge zu den Benchmarks PARIS (Passive Auto-catalytic Recombiner Interaction Studies) und CONDENSATION, die im Rahmen des Europäischen Exzellenznetzwerks SARNET (Severe Accident Research NETWORK) organisiert wurden, konnte der Umgang mit dieser Software und die Rechenkapazitäten erweitert werden.

Im Rahmen der Untersuchungen zu neuen Rekombinatorkonzepten wurden die Entwicklungsarbeiten zu passiv gekühlten Rekombinatoren, die einen effektiven und zugleich zündungsfreien Wasserstoffabbau ermöglichen sollen, fortgesetzt. Neben einer Optimierung der Katalysatorbeschichtung (Direktbeschichtung des Kühlkörpers anstatt Aufkleben einer Katalysatorfolie) wurden in Experimenten in der REKO-1-Anlage Korrelationen zur Beschreibung der Reaktionskinetik an diesen speziellen Katalysatorgeometrien ermittelt. In Vorbereitung einer möglichen Industriekooperation wird nun eine Anordnung zur Beseitigung von Wasserstofffreisetzungen in Rohrleitungen in den Versuchsanlagen des Wasserstofflabors getestet.

Im Zuge von Oxidationsuntersuchungen an kohlenstoffbasierten Materialien im Graphitoxidationslabor GOLab wurden Experimente an Materialien ausgeführt, die zur Verbesserung der Oxidationsresistenz mit oxidationshemmenden Zusätzen versehen waren (Zirkoncarbid, Titancarbid, Borcarbid, Siliciumcarbid). Eine markant oxidationshemmende Wirkung in Sauerstoff oder Wasserdampf wurde nur für relativ große Anteile dieser Zusätze im Grundmaterial gefunden. Kohlenstoffmaterialien mit geringer Oxidationsneigung sollen in der Kernspaltung und in der Kernfusion, aber auch in Luft- und Raumfahrt und anderen Technologiebereichen Anwendung finden. Daneben wurden am Politecnico di Torino neu entwickelte Beschichtungen auf kohlenstoffbasierten Grundmaterialien getestet, insbesondere Mehrfachbeschichtungen. Erste Experimente in Sauerstoff waren bis hin zu extrem hohen Temperaturen (1500°C) erfolgreich, d.h. die Mehrfachbeschichtung verlor nicht ihre oxidationshemmende Wirkung. Weitere Untersuchungen an diesen

Beschichtungen sind jedoch noch erforderlich. Die Arbeiten wurden durch das EU-Projekt ExtreMat gefördert.

Experimente zur Oxidationskinetik der Reaktion zwischen Kohlendioxid und Graphit bei Temperaturen bis 1300°C wurden im Graphitoxidationslabor GOLab durchgeführt, um die Aussagesicherheit von Störfalluntersuchungen für Luftfeinbruchstörfälle in nuklearen Systemen wie Hochtemperaturreaktoren und Fusionsreaktoren zu erhöhen. Speziell für Sicherheitsbewertungen von Hochtemperaturreaktoren sind diese Untersuchungen von Bedeutung, da bei schweren Luftfeinbruchstörfällen mit Graphitbrand der Sauerstoff häufig schon außerhalb des inneren Reaktorkerns umgesetzt wird, das Kohlendioxid aber bis in den inneren Reaktorkern vordringen und dort die Brennelemente zerstören kann. Dementsprechend erfolgten die Experimente überwiegend an dem für das Europäische Block-HTR Projekt vorgesehenen Graphit NBG-17. Die Arbeiten wurden aus dem EU-Vorhaben Raphael-ML gefördert.

Eine Analyse der Ursachen erhöhter Kontamination des Jülicher AVR-Reaktors mit metallischen Spaltprodukten wurde durchgeführt. Als wesentlicher Faktor hierfür wurden die unerwartet hohen Temperaturen im AVR-Reaktorkern während des Betriebes identifiziert. Anforderungen an die diesbezügliche sichere Auslegung zukünftiger Kugelhaufen-HTR wurden erarbeitet.

#### Entwicklungsarbeiten zum Programmsystem MGT:

Das Bestreben nach kontinuierlicher Verbesserung der Simulations-Genauigkeit reaktorphysikalischer Vorgänge - hier speziell der Neutronendynamik- mit dem Ziel einer Erhöhung der Sicherheit gegenwärtiger und zukünftiger Reaktorkonzepte führte zur Entwicklung des Programmsystems MGT (Multi-Gruppen-Derivat von TINTE). Mit Abschluss der Entwicklung einer ersten Version wurden ausgedehnte, systematische Studien zur Validierung des Programms durchgeführt. Hierzu wurden sowohl integrale als auch räumlich und zeitlich veränderliche Parameter für verschiedene Modelle (variable Anzahl von Neutronen-Energiegruppen sowie unterschiedliche Berechnungsmethoden für Wirkungsquerschnitte) in stationären und in ausgesuchten transienten Betriebssituationen miteinander verglichen. Gegenwärtige Untersuchungen dienen der problemspezifischen Optimierung der Breitgruppenstruktur des Neutronenspektrums.

Parallel dazu wurde die Modellgenauigkeit einzelner Programmteile erhöht, z.B. zur Simulation von Stabfahrtransienten. Durch Optimierung der Routinen zur Bestimmung virtueller Stabpositionen in einem diskreten 2D-Gitter-Modell sollten modellbedingte Schwingungen um den Sollwert deutlich reduziert werden können.

Durch die Entwicklung von automatisierten Analyse- und Visualisierungsprogrammen steht nun ein flexibles und komfortables Auswertesystem für Daten sowohl von TINTE als auch von MGT zur Verfügung.

Ein weiteres Arbeitsziel ist die Entwicklung alternativer sowie die Optimierung bestehender numerischer Lösungsverfahren für Grobmaschen-Differenzenverfahren im Hinblick auf eine spätere Anwendung auf dem "Supercomputer". Hierzu wurden erste vorbereitende Arbeiten durchgeführt. Dazu zählen Messungen der Laufzeit diverser Subroutinen sowie die Adaptierung bestehender Algorithmen auf ein homogenes (Programmier-) Sprachniveau.

#### Weiterentwicklung des Thermohydraulikprogramms DIREKT:

In Vorbereitung eines "OECD/NEA/NSC PBMR"- Workshops" und der damit verbundenen, internationalen Anwendung des Computerprogramms DIREKT wurden umfangreiche Arbeiten zu dessen Weiterentwicklung durchgeführt. In Hinblick auf die Portierbarkeit des Programms und auf seine Anwendung unter verschiedenen Betriebssystemen wurden geeignete Compiler ausgetestet und getestet. Zur Berechnung des Druck- sowie des Gastemperaturfeldes wurde eine von lizenzierten Bibliotheken unabhängige Lösungsroutine erstellt und eingebaut. Die Ergebnisse der stationären und transienten Rechenläufe wurden daraufhin mit den auf Workstationrechnern erzielten Resultaten verglichen. Hierbei konnte eine exakte Übereinstimmung festgestellt werden.

Die Dateneingabe zur Definition des Maschengitters wurde sowohl für den Feststoffteil als auch für den Konvektionsteil des Programms modifiziert. Die Dokumentation wurde aktualisiert und eine Beschreibung der Herleitung der Hauptlösungsgleichungen des Konvektionsteils, die auf der Kontinuitäts-, der Impuls- und der Energiegleichung basieren, erstellt.

Die Forschungsarbeiten am IEF-6 zielen auf die Erfüllung der Kriterien der Nachhaltigkeit und der Sicherheit für den gesamten Brennstoffkreislauf einschließlich der laufenden und künftigen Kernreaktoren. Ein besonderer Schwerpunkt ist dabei Transmutationsforschung mit dem Ziel der effektiven Vernichtung langlebiger Radioisotope und deren reduzierter Erzeugung in den KKW. Aufgrund der komplexen Natur der Sachverhalte werden bei den laufenden Forschungsaufgaben unter dem Einsatz von Massiv-Parallelrechnern präzise Rechenmodelle und parallele Algorithmen entwickelt und eingesetzt, welche die Simulation der nuklearen und thermohydraulischen Vorgänge sowie deren Wechselwirkungsmechanismen in hoher zeitlicher und räumlicher Auflösung erlauben.

Im Berichtszeitraum 2007 wurde unter der Anwendung des Monte-Carlo-Verfahrens hochdimensionale Brennelement- und Reaktormodelle mit dem MOX-Brennstoff entwickelt und zum Zweck des internationalen Benchmarkings auf das KKW Obrigheim (KWO) angewandt. Parallel wurde das Verhalten der neuen Brennstoffvariante (Inert-Fuel Matrix) im Reaktorkern des KWO im Hinblick auf das Transmutationspotential, den Brennstoffabbau, die Sicherheitseigenschaften als Grundlage für ein innovatives Brennstoffkonzept untersucht.

## **PT2 (a) Charakterisierung und Immobilisierung von radioaktivem Abfall**

### Radiologische Charakterisierung:

Bei der Charakterisierung inhomogener radioaktiver Abfälle und insbesondere wenn stark abschirmende Strukturen vorhanden sind, liefert das segmentierte Gamma-Scanning fehlerhafte Ergebnisse. Dies ist auf eine unzureichende Berücksichtigung der tatsächlich vorhandenen Informationen bei der Auswertung aufgrund einer fehlenden geeigneten Auswerteprozedur zurückzuführen. Zur Verbesserung der Genauigkeit und Richtigkeit von Gamma-Scan-Messungen wurde eine Auswertemethode auf der Basis der numerischen Simulation entwickelt und an realen inhomogenen Abfallgebunden mit bekannter Aktivität und Matrixzusammensetzung erfolgreich getestet. Diese Auswerteprozedur soll weiterhin in eine benutzerfreundliche Auswertesoftware umgesetzt werden.

### Chemotoxische Charakterisierung:

Die Deklaration von potenziell wassergefährdenden Stoffen (z. B. Schwermetallen) in radioaktiven Abfällen ist durch den Planfeststellungsbeschluss für das Endlager Konrad notwendig geworden. Zur Ermittlung und Überprüfung dieses Inventars ist ein zerstörungsfreies Analyseverfahren auf Basis der Prompt-Gamma-Neutronen-Aktivierungs-Analyse (PGNAA) in Entwicklung. Das PGNAA-System besteht aus einem 14 MeV Neutronengenerator zur Neutronenbestrahlung des Messobjektes, einem Germanium-Detektor zum Nachweis der aus dem Messobjekt emittierten Prompt-Gammastrahlung und einer Graphitmesskammer als Neutronenreflektor, bzw. -absorber. Für die Auslegung und Optimierung des PGNAA-Systems wurden numerische Simulationen der Neutronen- und Gammastrahlungsvorgänge in Messobjekten mit verschiedenen Zusammensetzungen mit dem Programm MCNP (Monte-Carlo-N-Particle) durchgeführt. Weiterhin wurden aus Strahlenschutzgründen die Neutronen- und Photonendosisleistungen an den angrenzenden Nachbarräumen des Experimentiertortes berechnet.

## **PT2 (b) Reduzierung der Radiotoxizität (Partitioning and Transmutation)**

Eine Alternative zur Endlagerung langlebiger Radionuklide ist die Verringerung ihrer Erzeugung (Vermeidung) durch den Einsatz alternativer Brennstoffe bzw. die Abtrennung (Partitioning) dieser Nuklide aus den radioaktiven Abfällen und ihre anschließende Umwandlung (Transmutation) in kurzlebige oder nichtradioaktive Stoffe. Diese Arbeiten zu P&T verfolgen das vordringliche Ziel, die Menge der in ein geologisches Endlager für radioaktive Stoffe einzubringenden langlebigen toxischen Radionuklide zu minimieren.

Im Rahmen des EU-Vorhabens EUROPART wurden weitere Grundlagenuntersuchungen und Prozessoptimierungen zur selektiven Actiniden(III) Trennung aus flüssigen hochradioaktiven Brennstofflösungen durchgeführt. Im Vordergrund der Arbeiten standen theoretische Untersuchungen zur Evaluierung der in 2006 erfolgten Prozessläufe (Meilenstein 2006) zur Actinidenextraktion mit Hilfe des im FZJ entwickelten TODGA-TBP Prozesses. Die Untersuchungen zeigten eine gute Übereinstimmung der experimentellen Ergebnisse mit Vorhersagen der Modellrechnungen. Die im Rahmen der erfolgreichen Zusammenarbeit mit der CEA und dem ITU in Karlsruhe erzielten Ergebnisse wurden 2007 in referierten Journalen veröffentlicht und auf Fachkongressen präsentiert (9th P&T Exchange Meeting in Frankreich und Global 2007, USA)

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten waren Untersuchungen zur radiolytischen und hydrolytischen Stabilität von selektiven Extraktionsmitteln die an der Uni Reading (BTBPs) und der Uni Madrid (Bis-Diglykolamide) entwickelt wurden.

Das EUROPART-Vorhaben konnte Mitte 2007 erfolgreich abgeschlossen werden und ein Nachfolgeprojekt ACSEPT (Actinide reCYcling by SEParation and Transmutation) wurde beantragt. Das FZJ war als Leiter des Working package 4 (Co-conversion) maßgeblich an der Vorbereitung beteiligt. Das im November 2007 im 7. Rahmenprogramm der EU genehmigte Projekt mit einer Laufzeit von 4 Jahren (2008-2011) beginnt im März 2008. Das FZJ wird im Rahmen dieses internationalen Vorhabens wichtige Aspekte zur Prozessentwicklung bearbeiten.

Mit finanzieller Unterstützung des Instituts wurden am GAMMA-3 target des Nuclotron Strahls in Dubna, Russland, verschiedene Experimente mit 2,33 GeV Deuteronen ausgeführt. Das GAMMA-3 target besteht aus einem massiven Bleiblock von 8 cm Durchmesser und 60 cm Länge der als Spallationstarget in einem Graphitblock eingebettet ist. Jeweils 3 Proben der Isotope I-129, Np-237, Pu-238 und Pu-239 wurden für 25 Stunden mit Spallationsneutronen aus dem mit Deuteronen der kinetischen Energie 2,33 GeV beschossenen Bleitarget bestrahlt. Innerhalb des Graphitblocks wurden die Proben in unterschiedlichem Abstand zur Strahlachse positioniert, um den optimalen Neutronenfluss sowie deren Energie zu bestimmen. Mithilfe der transmutierbaren Isotope wurden Umwandlungsraten bei maximalem Neutronenfluss bestimmt. Diese Experimente wurden von der Dubna-Marburger Kooperationsgruppe im März 2007 durchgeführt und sollen weiterverfolgt werden.

Um unabhängig von den externen Bestrahlungsmöglichkeiten in Zukunft auch Experimente zur Transmutation am IEF-6 durchführen zu können, wird derzeit die Möglichkeit geprüft, Neutronengeneratoren (NGs) zu entwickeln, die 14 MeV Neutronen .genügender Dichte für derartige Untersuchungen produzieren. Da kommerzielle NGs nur bis maximal 10<sup>12</sup> n/s im radialen Feld erzeugen, muss versucht werden, den Neutronenfluss für Transmutationsexperimente mithilfe neuer Entwicklungen etwa um den Faktor 100 zu erhöhen. Diese Experimente dienen der Bereitstellung von Grundlagendaten für ein zukünftiges ADS (Accelerator driven Systems) Konzept.

## **PT2 (c) Sicherheitsforschung zur Endlagerung**

In der Betriebsphase des Jülicher AVR Kugelhaufenreaktors hat sich an den Rohrwänden des Kühlkreislaufes und der Kugelbeschickungsanlage Graphitstaub abgelagert. Die Mobilität des Graphitstaubs sowie der Radionuklidgehalt und die Korngröße sind für den Rückbau, aber vor allen für zukünftige HTR-Bauvorhaben von großer Bedeutung. Zur Charakterisierung dieser Parameter wurden verschiedene Methoden entwickelt, die die Bestimmung von mobilem und fest anhaftendem Graphit an Rohrwänden sowie eine Partikelgrößenbestimmung ermöglichen. Des Weiteren wurden bestehende Methoden zur Bestimmung des Radionuklidgehalts in radioaktiven Abfällen für die Untersuchung kleinster Mengen Graphitstaub modifiziert. Diese Entwicklungen führten direkt in Anschluss zu einem Drittmittelauftrag der Fa. PBMR (Südafrika).

Das vollkeramische Brennelement (BE) des Hochtemperaturreaktors (HTR) besteht aus kleinen Brennstoffpartikeln, die von gasdichten Hüllen aus Pyrokohlenstoff und Siliziumcarbid (SiC) umgeben (sog. Coated Particles, CP's) und in eine Graphitmatrix eingebettet sind. Die chemische und mechanische Langzeitstabilität von HTR-BE bei der direkten Endlagerung wird im FZJ untersucht.

Falls aus Gründen der Volumenreduktion keine kompletten Brennelemente, sondern nur die CP's endgelagert werden sollen, müssen diese in eine geeignete Matrix eingebettet werden. Siliziumcarbid erfüllt mit hoher Wahrscheinlichkeit alle Anforderungen, die an ein solches Einbettungsmaterial gestellt werden. Die im Jahr 2006 begonnenen Untersuchungen zur Wasserdurchlässigkeit von SiC wurden abgeschlossen. Die erzielten Ergebnisse zeigen, dass die SiC-Matrix wasserundurchlässig ist und somit als weitere technische Barriere bei der Endlagerung geeignet ist.

Uranocarbide (UC<sub>2</sub>) und Uranoxycarbide (UCO) wurden in der Anfangsphase des AVR als Kernbrennstoff eingesetzt. Da diese Materialien einen höheren Abbrand als UO<sub>2</sub> erlauben, sind sie im Rahmen von modernen Reaktorkonzepten, wie in GEN IV beschrieben, wieder von Interesse. Da bei der Endlagerung solcher Brennelemente über sehr lange Zeiten der Kontakt zwischen Brennstoffpartikeln und wässrigen Phasen nicht ausgeschlossen werden kann, wurde mit der Untersuchung des Verhaltens unbestrahlter Uranocarbide in endlagerrelevanten Wässern begonnen. Dabei zeigte sich, dass innerhalb kurzer Zeit das

Urancarbide in Salzlauge (ges.  $MgCl_2$ ) vollständig zersetzt wird. Dabei entstehen Korrosionsprodukte, mit deren Untersuchung begonnen wurde. Erste Ergebnisse werden für Anfang 2008 erwartet.

Diese Arbeiten werden im Rahmen des EU-IP RAPHAEL (ReActor for Process Heat, Hydrogen and Electricity Generation) durchgeführt, bei dem das FZJ federführend für das Arbeitspaket 3 (Back-End of the Fuel Cycle) verantwortlich ist. Weitere Untersuchungen hinsichtlich des Endlagerverhaltens von Graphit bzw. der Dekontamination von Nukleargraphit sind im neuen EU-Projekt CARBOWASTE geplant, das voraussichtlich März 2008 beginnen wird.

Ein Forschungsschwerpunkt des IEF-6 beinhaltet Untersuchungen zur direkten Endlagerung von bestrahlten Forschungsreaktorbrennelementen (FR-BE) in tiefen geologischen Formationen. Die Untersuchungen konzentrieren sich auf die FR-BE-Typen mit den Dispersionsbrennstoffen metallisches Uran/Aluminium beziehungsweise Uransilizid/Aluminium. Das Eindringen von wässrigen Lösungen (Salzlauge, Tonporenwasser und Wasser aus kristallinem Gestein) kann im Endlager nicht grundsätzlich ausgeschlossen werden. Es hat sich herausgestellt, dass die FR-BE in diesen Wässern korrodieren und Radionuklide mobilisiert werden. Für die mobilisierten Radionuklide stellen die gebildeten Korrosionsprodukte dann allerdings die erste Barriere hinsichtlich einer weiteren Ausbreitung in die Biosphäre dar.

Um die Rückhalte-mechanismen der Radionuklide auf molekularer Ebene zu beschreiben, stellt die Identifizierung der Phasenbestandteile der Korrosionsprodukte eine unabdingbare Voraussetzung dar. Bislang konnten als kristalline Phasenbestandteile der Korrosionsprodukte Lesukite und Mg-Al-Cl-Hydrotalkite identifiziert werden und es wurde damit begonnen aufzuzeigen, wie Elementspezies durch den Mg-Al-Hydrotalkit zurückgehalten werden. Als Rückhalte-mechanismen kommen Sorption (reversibel) und Inkorporation (Irreversibel) in Betracht.

Es konnte gezeigt werden, dass das zweiwertige Magnesium im Kristallgitter des Mg Al Cl-Hydrotalkites durch andere zweiwertige Elementspezies partiell ausgetauscht werden kann. Diese inkorporierten Elementspezies sind dann irreversibel gebunden. Zudem ist es möglich, auch das trivalente Aluminium durch andere trivalente Elementspezies partiell auszutauschen. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass sowohl zwei- als auch dreiwertige Elementspezies eingebaut und dadurch irreversibel fixiert werden können. Inwieweit dies auch für tetravalente Spezies möglich ist, wird gegenwärtig untersucht.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Das FZJ hat seine Bemühungen zur Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses auf dem Gebiet der Kerntechnik verstärkt. So wurden in 2007 sechs neue Doktoranden eingestellt, alle mit Drittmittelfinanzierung, zwei davon mit Industriestipendien. Damit werden im FZJ zum Stichtag 31.12.2007 zwölf Promotionen mit kerntechnischen Themen betreut. Außerdem wurde eine Postdoc-Stelle neu besetzt, zwei weitere sind ausgeschrieben. Die beiden Institulleiter halten Vorlesungen, Übungen und Praktika an der RWTH Aachen, mehrere Institutsmitarbeiter halten zudem Vorlesungen zu kerntechnischen Themen an der FH Aachen/Jülich.

Mit Erlösen in Höhe von 1,9 Mio. EUR zzgl. Lizenzeinnahmen konnten die Drittmiteleinahmen in einer vergleichbaren Höhe wie im Vorjahr gehalten werden.

## **Weitere Programmentwicklung**

Am 7. und 8. März 2007 tagte auf Veranlassung des Aufsichtsrats des Forschungszentrums Jülich eine Strukturkommission für das Institut für Energieforschung - Sicherheitsforschung und Reaktortechnik (IEF-6). Die Kommission unter Vorsitz des HGF-Programmsprechers Nuklear empfiehlt eine Neuausrichtung und Fokussierung des IEF-6 auf die drei Themenschwerpunkte Nukleare Systeme, Brennstoffkreislauf und Nukleares Abfallmanagement mit Modellierung / High-Performance-Computing als Querschnittsaufgabe. Mit der Umsetzung dieser Empfehlungen ist begonnen worden (siehe <http://www.fz-juelich.de/ief/ief-6/> ).

Im Rahmen der Einrichtung von vier nuklearen Professuren an der RWTH Aachen und am Forschungszentrum Jülich sowie der strategischen Zusammenarbeit mit den umliegenden Universitäten im Bereich Energieforschung wird es im Laufe der kommenden Jahre auch zu programmatischen Verschiebungen kommen. Außerdem werden die Planungen für ein neues Institutsgebäude mit modernen Radionuklidlabors und Heißen Zellen für das IEF-2/IEF-6 in diesem Jahr intensiviert.

# Geosystem: Erde im Wandel

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 2 Erde und Umwelt
- **2.1 Geosystem: Erde im Wandel**
- 2.1.3 Klimavariabilität und Lebensraum des Menschen

**Beteiligte Institute:** [ICG](#), [ZCH](#)

**Verantwortlich:** Dr. Andreas Lücke, ICG, [a.luecke@fz-juelich.de](mailto:a.luecke@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)

[Patente](#)

---

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im Zentrum der Aktivitäten des Forschungszentrums Jülich in Programm 1 stehen "Klimavariabilität und menschlicher Lebensraum". Der methodische Ansatz der Arbeiten liegt in der Durchführung umfassender Feld- und Laborstudien an natürlichen Klimaarchiven zur Ableitung von Transferfunktionen sowie der Bestimmung verschiedener Proxydaten (z.B. Isotopenverhältnisse, Elementkonzentrationen) aus zeitlich hochaufgelösten Klimaarchiven unterschiedlichster regionaler Herkunft, im wesentlichen Seesedimente und Baumringchronologien. Ziele dieses Ansatzes sind die Entwicklung von Transferfunktionen und die Reduktion von Unsicherheiten von Klimarekonstruktionen, die Klimarekonstruktion inklusive der Erfassung schneller Klimaänderungen und extremer Klimaereignisse, sowie die Untersuchung von Antriebsfaktoren (natürlich und anthropogen) unter besonderer Berücksichtigung des solaren Einflusses. Eingebettet in diese Arbeiten ist die Methodenentwicklung im Bereich "Zeitreihenanalyse und Modellierung". Die bisher durchgeführten Arbeiten haben sich streng an den Programmzielen orientiert, wobei die Bearbeitung von Fragestellungen zur Erweiterung des Proxydatenspektrums zum Teil neue, innovative Ansätze erforderte. Strategisch waren keine Änderungen notwendig.

Die Jülicher Arbeiten sind eingebunden in das Helmholtz-Programm "Geosystem: Erde im Wandel". Schwerpunkt des Programms ist die Beobachtung der dynamischen Prozesse des Erdinneren, der Erdoberfläche und des oberflächennahen Weltraums mit einem integrierten methodischen Spektrum als Grundlage für die Quantifizierung und Modellierung dieser Prozesse mit dem Ziel der Abschätzung von Wirkungen auf den menschlichen Lebensraum und der Entwicklung nachhaltiger Nutzungsstrategien für geologische Ressourcen. Das Programm gliedert sich in fünf Programmthemen, die die gesamte Kette im System Erde von der globalen Vermessung, über die regionale Analyse gekoppelter Prozesse bis zum Gefährdungs- und Nutzungspotential auf der menschlichen Skala abdecken. Dies sind: 1. Globale Prozesse und Geomonitoring; 2. Geodynamik, Stoffkreisläufe und Ressourcen; 3. Klimavariabilität und menschlicher Lebensraum; 4. Naturgefahren und 5. Geoengineering.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

Für die Darstellung der Ergebnisse bietet sich die strukturbedingte Aufteilung der Arbeiten in Zeitreihenanalyse und Modellierung, Rezentstudien und Klimarekonstruktion aus Archiven, sowie technologische Entwicklungen an.

Als Klimaarchive wurden Sedimente aus Süßwasserseen Mitteleuropas (z.B. Holzmaar und Meerfelder Maar (Eifel), Lago Grande di Monticchio (Italien)), des asiatischen Raums (tibetisches Plateau, chinesische Küstenregion, Israel), und der südlichen Hemisphäre (Südpatagonien) sowie Jahrringe von Bäumen aus Norddeutschland, der Schweiz, Südeuropa (Italien, Spanien), Ostasien (Nordpakistan, Tibet, Mongolei, Ostsibirien) und Patagonien herangezogen.

Im Bereich **Zeitreihenanalyse und Modellierung** wurden neben der Entwicklung neuer Methoden die Vergleiche von Klimaproxydatenarchiven unterschiedlicher Entstehung und unterschiedlicher geographischer Herkunft weitergeführt. Untersuchungsschwerpunkt ist weiterhin die Erklärung von langfristigen Trends, nichtlinearem Systemtransfer und abrupten Änderungen im Systemverhalten. Der methodische Schwerpunkt lag auf der Analyse von kombinierten Phänomenen in Zeitreihen. Die Unterscheidung von langfristigen Trends, durch abrupte Systemveränderungen getrennte unterschiedliche Zustände und Rauschen konnte durch Clusteranalyse- und Optimierungsverfahren formalisiert werden. Die Erfassung und Analyse von Ereignislagen in Seesedimenten wurde im Zusammenhang mit extremen Niederschlagsphänomenen durchgeführt, um die statistischen Grundlagen für die Berechnung der Wahrscheinlichkeit extremer Flutereignisse (FFA, flood frequency analysis) zu verbessern.

Der Bereich **Rezentstudien** befasst sich mit umfassenden Untersuchungen an Seen und Baumstandorten. Im Vordergrund steht die Frage, wie Klimagrößen (etwa Temperatur, Niederschlag, relative Luftfeuchte usw.) mit Messdaten, z.B. Isotopenverhältnissen aus den Archiven verknüpft werden können. Messgrößen, die im Wesentlichen durch klimatische Einflüsse bestimmt werden, werden auch als Klimaproxies bezeichnet. Prozessorientierte Untersuchungen über die Genese derartiger klimatischer Proxyparameter sind unabdingbare Voraussetzung für eine fundierte Rekonstruktion vergangener Klimate aus Klimaarchiven sowie zur Unterscheidung natürlicher und anthropogener Anteile am Klimawandel. Die laufenden Rezentstudien sind so ausgelegt, dass sie die gleichzeitige Messung von Proxydaten und den zugehörigen meteorologischen Größen erlauben. Da meteorologische Daten vieler Standorte nur für die letzten Dekaden zur Verfügung stehen, beschränken sich Rezentstudien meist auf einen sehr kurzen Zeitraum. Im vorliegenden Fall kann für Seen auf mehr als 10 Jahre und bei Bäumen auf etwa 45 Jahre zurückgegriffen werden. Darüber hinaus gehören zu diesen Studien Laboruntersuchungen, welche eine eindeutige Verfolgung aller Messparameter erlauben.

Im Holzmaar, einem Kratersee der Eifel (Deutschland) führte eine Kalibrierungsstudie zur weltweit ersten Sauerstoffisotopentemperaturskala für biogenen Opal, die unter natürlichen Bedingungen erstellt wurde. Die Ergebnisse über die Beziehung zwischen den stabilen Sauerstoffisotopen biogenen Opals von Kieselalgen (Diatomeen) und der Wassertemperatur wird mittelfristig zur Etablierung eines Sauerstoffisotopenthermometers zur Rekonstruktion von Sommertemperaturen führen. Unsere Untersuchungen konnten zudem zeigen, dass das temperaturgeprägte Isotopensignal im Opal lebender Diatomeenzellen im Zuge der Sedimentation und der Einlagerung ins Sediment einer wahrscheinlich altersabhängigen Veränderung unterliegt. Dieser angenommene Alterstrend führt möglicherweise zu starken Veränderungen der Absolutwerte. Inwieweit auch die relativen Variationen, die als Gradmesser für Temperaturveränderungen der Vergangenheit dienen sollen, von dieser Alterung betroffen sind, müssen weitergehende detaillierte Untersuchungen an Kernmaterial zeigen.

Der Einfluss der Solarstrahlung auf das Energiebudget und das Klima der Erde auf langen Zeitskalen ist relativ gut bekannt. Auf kürzeren Zeitskalen etwa von Jahrhunderten könnte dagegen der UV-Spektralbereich der Solarstrahlung, mit Variationen bis zu 10%, einen wesentlichen Faktor für die Wolkenbildung in der Atmosphäre und die Primärproduktion von Algen darstellen. Die Analyse einer zehnjährigen saisonalen Messreihe der Secchitiefe, einem Maß für die Primärproduktion eines Sees, hat Hinweise auf eine Beziehung zwischen solarer Aktivität und der Algenproduktion im Holzmaar ergeben. Darüber hinaus konnten wir sogenannte "sun-screening compounds", die einen natürlichen Sonnenschutz von Algen darstellen, sowohl in den jungen Sedimenten des Holzmaares als auch in Algenkulturen aus dem Labor nachweisen. Die Menge dieser mycosporin-ähnlichen Aminosäuren steht in Beziehung zur UV-Strahlung, der die Algen ausgesetzt waren. Daher besitzen diese Verbindungen möglicherweise das Potential zur Ermittlung der Variationen der UV-Strahlung vergangener Epochen. Die Arbeiten wurden auf die Untersuchung von Sedimentproben aus dem letzten Jahrtausend ausgeweitet, mit dem Ziel die Beständigkeit dieser Verbindungen gegenüber mikrobiellem Abbau zu prüfen.

Im Rahmen eines aktuogeologischen Ansatzes für die letzten Jahrhunderte wurden die Auswirkungen der Gewässereutrophierung auf die lakustrine Bioproduktivität im Bodensee und deren Fingerprint im Sediment untersucht werden. Darüber hinaus sollte geprüft werden, inwieweit sich hydrologische Extremereignisse in den Bodenseesedimenten durch die Anwendung isotopengeochemischer Parameter charakterisieren lassen (Kooperation mit der TU Braunschweig). Es konnte gezeigt werden, dass die ab ca. AD 1870 steigenden Konzentrationen des organischen Kohlenstoffs und des Stickstoffs zeitgleich mit einem abfallenden Trend der Kohlenstoffisotopie des organischen Materials auftreten. Dieses prägnante Muster ist in beiden untersuchten Kernen sehr gut zu erkennen. Hierin spiegelt sich die Eutrophierungsgeschichte des Bodensees wider, die nach diesen Daten um AD 1880 einsetzte und seit AD 1940 durch den massiven Einfluss des Menschen verstärkt wurde. Ab AD 1990 scheint ein Maximum der Produktivität erreicht zu sein bzw. ein anderer Nährstoff wachstumslimitierend zu wirken. D.h. die Eutrophierung des Bodensees und

damit die höhere Primärproduktion wird durch den langfristigen Trend in der Isotopenzusammensetzung des organischen Kohlenstoffs und des Stickstoff prägnant abgebildet. Auf diesen langfristigen Trend aufgesetzt sind einzelne Ereignisse insbesondere nach AD 1880 deutlich zu erkennen, die isotopengeochemisch durch Minima der Elementgehalte, sowie durch Maxima der Kohlenstoffisotopie gekennzeichnet sind. Aufgrund historischer Aufzeichnungen und der Lithologie der Sedimente wird deutlich, dass es sich hierbei um die Signatur einzelner Hochwässer im Sediment handelt. Daraus folgt, dass sich hydrologische Extremereignissen im Bodensee aufgrund ihres typischen isotopengeochemischen Musters, zumindest für das letzte Jahrhundert, sehr gut fassen lassen.

Untersuchungen der saisonalen Variationen der Sauerstoffisotopie von Laub- und Nadelbäumen am Lysimeterstandort St. Arnold (Münsterland, Deutschland) haben einen Zusammenhang zwischen kurzfristigen Defiziten in der Pflanzenwasserversorgung und den Isotopieveränderungen im Jahrring der Bäume erkennen lassen. Im Gegensatz dazu zeigen die entsprechenden Kohlenstoffisotopenverhältnisse ein ausgeprägtes langfristiges Verhalten. Basierend auf diesen Erkenntnissen aus der Rezentstudie konnte ein 400-jähriger Trockenheitsindex für die iberische Halbinsel erstellt werden.

Im Bereich **Klimarekonstruktion** sollen die folgenden Beispiele das Spektrum der vom Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre - Sedimentäre Systeme (ICG-5) geleisteten Arbeiten verdeutlichen:

Im Rahmen eines internationalen Projektes mit 39 europäischen Partnern (IP Millennium, 6tes. Rahmenprogramm) wird thematisiert, wie die im letzten Jahrhundert auftretenden Extremata des Klimawandels im Kontext des letzten Jahrtausends zu beurteilen sind. Gemeinsam mit Kollegen aus Schweden und Finnland werden zu diesem Zweck Torfablagerungen aus Skandinavien erschlossen und in Jülicher Laboratorien die isotopische Zusammensetzung (C, O) der erhaltenen Torfzellulose bestimmt. In den bisherigen Ergebnissen des Standortes Kiruna, Schweden, zeigt sich keine herausragende Sonderstellung der klimatischen Veränderungen während der letzten hundert Jahre, weder in Bezug auf Lufttemperaturen noch auf Niederschläge, gegenüber einer mehrhunderjährigen Vergleichsperiode. Längerfristige zyklische Veränderungen scheinen für das skandinavische Klima weitaus bedeutsamer zu sein als die in den letzten Jahrzehnten in Europa zu beobachtende Häufung von extremen Witterungsbedingungen. Die Untersuchungen werden fortgeführt.

<http://geography.swan.ac.uk/millennium/index.htm>

In Zusammenarbeit mit Kollegen vom GFZ Potsdam wurden die spätglazialen Sedimente des Meerfelder Maeres mit sehr hoher zeitlicher Auflösung untersucht. Der erstellte Multiparameter-Datensatz zeigt sehr deutliche und schnelle Veränderungen insbesondere zu Beginn und Ende der Jüngeren Dryas (12680 - 11560 Jahre vor heute). Die ermittelten Veränderungen müssen innerhalb von Jahren bis Dekaden stattgefunden haben. Obwohl die Jüngere Dryas generell als Kaltphase angesehen wird, ergeben sich aus den biologischen und isotopischen Parametern deutliche Anhaltspunkte für relativ warme Sommer mit hoher Algenproduktivität. Dies deutet auf eine starke Veränderung des saisonalen Temperaturgegensatzes hin und nicht auf eine generelle Abkühlung während der Jüngeren Dryas. Um ein rein lokales Phänomen auszuschließen, wurde zudem der Vergleich mit Signalen in entsprechenden Sedimenten eines Norddeutschen Sees (Hämelsee) durchgeführt. Dabei ergab sich ein hoher Grad an Übereinstimmung zwischen den Archiven. Auch im Hämelsee wurden starke Indizien für hohe Primärproduktion und relativ warme Sommer in den Kaltphasen gefunden. Darüber hinaus fanden die Übergänge zwischen den entsprechenden Phasen innerhalb weniger Dekaden und in beiden Seen gleichzeitig statt. Damit konnte der Nachweis geführt werden, dass diese schnelle Veränderung der Saisonalität wahrscheinlich in ganz Europa stattgefunden hat. Diese Arbeiten wurden auf den Ostasiatischen Raum ausgedehnt, um großräumige Telekonnektionen erfassen zu können.

*Parplies, J., Lücke, A., Vos, H., Mingram, J., Stebich, M., Radkte, U., Han, J., Schleser, G.H. (2008). Late glacial environment and climate development in northeastern China derived from geochemical and isotopic investigations of the varved sediment record from Lake Sihailongwan (Jilin Province). Journal of Paleolimnology (in press)*

Im Rahmen des vom BMBF geförderten Projektes "South Argentinean Lake Sediment Archives and Modelling" (SALSA, DEKLIM) wurden Sedimentkerne mehrerer Seen aus der südpatagonischen Steppenregion untersucht. Die Analyse eines 19 m langen Sedimentprofils erlaubt die Rekonstruktion der Umwelt- und Klimaänderungen während der letzten 16 000 Jahre in dieser für eine weltweite Klimamodellierung wichtigen Region. In Zusammenarbeit mit deutschen, schweizerischen und argentinischen Projektpartnern konnten starke hydrologische Schwankungen während des Holozäns nachgewiesen werden, die sich auch in subaquatischen und subaerischen Terrassen äußern, die vergangene Seespiegelstände markieren. Es zeigt sich, dass während der "Kleinen Eiszeit" auch im Bereich Südpatagoniens feuchtere Witterungsbedingungen und während einer Phase des mittleren Holozäns (8800 - 7800 Jahre vor heute) außerordentlich trockene Klimabedingungen herrschten. Die jüngsten Sedimente zeigen deutlich den Einfluss der unlängst erfolgten Besiedlung durch Europäer auf terrestrische und

limnische Ökosysteme durch die Einführung neuer Florenelemente und eine Zunahme der Brandhäufigkeit. Fortlaufendes Monitoring und Beprobungen der Seen durch argentinische Kooperationspartner erlaubte eine Abschätzung der Wasserbilanzen der untersuchten Seen, die in einer Quantifizierung vergangener hydrologischer Schwankungen mit Hilfe von Sedimentproxies münden werden. Darüber hinaus konnten Schwankungen der südhemisphärischen Westerlies für das Holozän nachgewiesen werden.

*Wagner, S., Widmann, M., Jones, J., Haberzettl, T., Lücke, A., Mayr, C., Ohlendorf, C., Schäbitz, F., Zolitschka, B. (2007). Transient simulations, empirical reconstructions and forcing mechanisms for the Mid-Holocene hydrological climate in Southern Patagonia. Climate Dynamics 29: 333-355.*

In enger Kooperation mit dem GeoForschungsZentrum Potsdam wurden die Arbeiten zum Vergleich von Paläoklimaarchiven aus unterschiedlichen Klimazonen verbunden mit der Analyse globaler interner und externer Antriebsmechanismen fortgeführt. Der schon beim Vergleich grönländischer Eiskerndaten mit den Warvenmächtigkeiten des Holzmaars gefundene Zusammenhang über den Einfluss von Änderungen des solaren Antriebs für den Zeitraum von 9000 bis 10 000 Jahren vor heute ließ sich auch für den Zeitabschnitt im Bereich des Kälteeinbruchs vor 8200 Jahren vor heute nachweisen.

Mehrhundertjährige Isotopenchronologien eines Standortnetzwerkes im Raum Baikalsee, der Mongolei und Jakutiens zeigen eine enge Verknüpfung der Sauerstoffisotopenverhältnisse mit der Sommertemperatur. Dagegen zeigen sich für die Kohlenstoffisotopenverhältnisse Korrelationen mit der mittleren Sommertemperatur der Monate Juni bis August. Analysen der räumlich-zeitlichen Zusammenhänge in den Sauerstoffisotopenchronologien deuten auf wechselnde Einflüsse unterschiedlicher atmosphärischer Zirkulationssysteme (Westwind, Monsun) in der Region hin.

Zur Erfassung langfristiger Veränderungen der räumlichen Niederschlagsverteilung, wurden unter Führung des ICG-5 im Rahmen eines EU-Projekts (ISONET) und gemeinsam mit 11 europäischen Forschungsinstituten, Isotopenchronologien für ein Netz von europäischen Standorten erstellt, die es erlaubt haben, lokale bis regionale Unterschiede in der Niederschlagsverteilung der letzten 400 Jahre zu rekonstruieren. Beispielsweise führt der aktuelle Klimawandel in vielen Regionen zu mehr Niederschlägen, in einigen Regionen aber, wie dem Mittelmeerraum zu trockeneren Verhältnissen. Diese deutet sich in der zunehmenden Häufigkeit von Waldbränden in Portugal und Spanien an und auch durch eine 400jährige baumringbasierte Rekonstruktion der Intensität der Sommertrockenheit auf der iberischen Halbinsel gezeigt werden. Darüber hinaus wurden in diesem Rahmen erstmals Hölzer tropischer Regionen (Kenya, Ostafrika; Guayana und Venezuela, Südamerika) erfolgreich auf ihr Potential zur Rekonstruktion von Niederschlags- und Feuchtebedingungen getestet.

Im Bereich **technologischer Entwicklungen** wurde das erste auf rein physikalischer Grundlage arbeitende Verfahren zur vollständigen Extraktion der Sauerstoffisotope aus Kieselalgenschalen etabliert (patentiert). Derzeit wird die direkte Kopplung dieser manuellen Präparationseinheit an ein Isotopenverhältnismassenspektrometer vorgenommen, um die Analysenkapazität zu erhöhen. Die Instrumentierung des weltweit größten Lysimeters (mit 50-jährigem Baumbestand) mit vier Messtürmen, einem Großkran und entsprechenden Begasungsvorrichtungen wurde abgeschlossen. Mit dem aufgebauten Kohlendioxid-Impulsbegasungssystem kann das Kohlenstoffisotopenverhältnis im atmosphärischen Kohlendioxid deutlich verändert werden, ohne den natürlichen Kohlendioxid Partialdruck wesentlich zu erhöhen. Am Lysimeter wurden isotopenmarkierte Begasungsexperimente kombiniert mit Photosynthesestudien durchgeführt. Das Lysimeter wurde vom staatlichen Umweltamt Münster zur Verfügung gestellt. Hintergrund ist die Bestimmung des Isotopentransfers von der Blattebene in den Jahrring auf der Basis sich ändernder meteorologischer Größen. Durch die direkte Kopplung eines UV-Lasers an ein Isotopenverhältnismassenspektrometer soll es zukünftig möglich werden, intra-annuelle Untersuchungen an Jahrringen mit einer zeitlichen Auflösung von bis zu einem Tag durchzuführen.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Mit der Universität Bonn wird ein Projekt zum Einfluss der UV-Strahlung auf die Isotopensignaturen in Jahrringen von Bäumen der oberen Waldgrenze im Karakorum (Nordpakistan) durchgeführt. Diese Thematik steht im Zusammenhang mit Fragen zum "solar forcing", d.h. der Frage nach dem solaren Antrieb in biogenen Systemen. Verknüpft damit ist der Versuch, einen neuen Proxyparameter zu etablieren, der möglicherweise die Rekonstruktion vergangener solarer UV-Schwankungen erlaubt. Darüber hinaus bestehen enge Kooperationen mit den Universitäten Erlangen, Göttingen und Bonn, sowie der Eidgenössischen Forschungsanstalt für Wald, Schnee und Landschaft (Birmensdorf, Schweiz) zum Aufbau von "Jahrring-Isotopen-Netzwerken". Mit der Universität Utrecht (Niederlande) und dem Musée royal de l'Afrique centrale (Tervuren, Belgien) werden Arbeiten zur tropischen Dendroklimatologie durchgeführt. Eine

enge Vernetzung besteht darüber hinaus mit den Universitäten Bremen und Köln in Zusammenhang mit den Arbeiten zur Klimavariabilität in Südamerika, mit der Universität Posen (Polen) im Rahmen der Rezentstudien am Holzmaar sowie mit dem Nanjing Institute of Limnology and Geography (Nanjing, China) zur Untersuchung von Seen und deren Sedimenten in Ostasien.

## Weitere Programmentwicklung

Die Jülicher Arbeiten zum Programm "Geosystem: Erde im Wandel" werden aufgrund einer strategischen Entscheidung des Vorstands mit Abschluss der laufenden POF-1-Programperiode Ende 2008 eingestellt werden.

---

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Atmosphäre und Klima

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 2 Erde und Umwelt
- **2.2 Atmosphäre und Klima**
- 2.2.3 Spurenstoffe in der Troposphäre
- 2.2.4 Stratosphäre und Tropopauseregion im globalen Wandel

**Beteiligte Institute:** [ICG](#), [S](#), [ZAT](#),

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Andreas Wahner, ICG, [a.wahner@fz-juelich.de](mailto:a.wahner@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlights

### Neue Erkenntnisse zum stratosphärischen Ozonverlust

Schon kurz nach der ersten Beobachtung des Ozonlochs über der Antarktis in den frühen 80er-Jahren durch die Forschergruppe um Joe Farman wurde dessen Entstehung mit dem starken Anstieg von Chlorverbindungen in der Stratosphäre durch vom Menschen produzierte FCKW in Verbindung gebracht. Deren Emission wurde daraufhin durch das Montreal-Protokoll und mehrere Folgeabkommen stark limitiert. Es gilt mittlerweile als weithin akzeptiert, dass Prozesse auf so genannten polaren Stratosphärenwolken, die eher unreaktiven Chlorverbindungen Salzsäure (HCl) und Chlornitrat (ClONO<sub>2</sub>) in aktive Chlorradikale umwandeln, welche in der Folge Ozon in katalytischen Kreisläufen zerstören. Die Geschwindigkeit der Ozonerstörung über diesen Mechanismus hängt dabei wesentlich von einem Prozess ab: der Photolyse des ClO-Dimers, also der Zersetzung eines Zwischenprodukts durch Sonnenlicht.

Eine im April 2007 veröffentlichte Studie von F. Pope behauptet nun, dass der ClO-Dimer Sonnenlicht viel schwächer absorbiert als bisher angenommen. Die Photolyse in der Stratosphäre wäre viel langsamer und die bekannten katalytischen Kreisläufe würden nicht zu einem Ozonloch führen. Unweigerlich stellt sich die Frage, ob wir die polare Ozonchemie tatsächlich verstehen und ob die Modelle, mit denen Wissenschaftler die zukünftige Entwicklung und den Erfolg des Montreal-Protokolls abschätzen, zuverlässig sind. Die Ergebnisse stehen jedoch im klaren Widerspruch zu einer Fülle atmosphärischer Messungen, die von Jülicher Wissenschaftlern im Rahmen von Flugzeugkampagnen in der Arktis durchgeführt wurde.

*von Hobe, M.; Salawitch, R. J.; Canty, T.; Keller-Rudek, H.; Moortgat, G. K.; Groß, J.-U.; Müller, R.; Stroh, F., Understanding the kinetics of the ClO dimer cycle, Atmospheric Chemistry and Physics, 7 (2007), 3055 - 3069*

Daneben stehen noch ein paar offene Fragen hinter den neuen Labordaten und deren Interpretation. Ende 2007 haben JÜLICHER Wissenschaftler mit Kollegen der Bergischen Universität Wuppertal neue Experimente durchgeführt und auf der Herbsttagung der American Geophysical Union vorgestellt. Diese deuten darauf hin, dass Pope et al. möglicherweise den Beitrag von molekularem Chlor, Cl<sub>2</sub>, in ihren Spektren überschätzt haben. Ob die Studie von Pope et al. widerlegt wird oder ob einige chemische

Mechanismen der polaren Ozonzerstörung umgeschrieben werden müssen, bleibt abzuwarten. Auf keinen Fall ist es angebracht, die Rolle der FCKW und das Montrealer Protokoll in Frage zu stellen - zu deutlich ist die Verbindung von beobachtetem Ozonverlust und stratosphärischem Chlor.

*von Hobe, M., Revisiting Ozone Depletion, Science, 318, 1878-1879, 2007*

## **Neue Erkenntnisse zur Selbstreinigungsfähigkeit der Troposphäre**

In den asiatischen Ballungsräumen um Beijing und im eher ländlich geprägten Pearl-River-Delta (PRD) wurden 2006 die internationalen Feldkampagnen CAREBEIJING und PRIDE-PRD2006 durchgeführt. Die Auswertung der Messungen im Pearl-River-Delta ergab sehr stark erhöhte OH-Konzentrationen, die sich mit den etablierten Vorstellungen über photochemische Prozesse nicht erklären lassen. Es konnte hier gezeigt werden, dass es in PRD einen dominierenden, bisher unbekanntem Rezyklierungsprozess für Hydroxylradikale geben muss, der die OH-Radikale nach ihrer Reaktion mit Schadstoffen wieder zurückbildet. Eine solche Rezyklierung erfolgt nach dem derzeitigen Verständnis der Photochemie ausschließlich durch NO. NO selbst konnte durch die Messungen aber ausgeschlossen werden. In ihrer Konsequenz führen sie in PRD letztendlich zu einem stark beschleunigten Schadstoffabbau, ohne dass dabei der sekundäre Luftschadstoff Ozon gebildet wird. Die für PRD gefundenen Ergebnisse sind wahrscheinlich auf andere biogen dominierte Gebiete übertragbar, in denen der größte Teil der globalen Kohlenwasserstoffemissionen stattfindet.

## **Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich**

Atmosphärische Spurengase und Aerosole bestimmen die Luftqualität und beeinflussen den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und damit das Klima. Die Zusammensetzung und Verteilung dieser Spurenstoffe in Raum und Zeit sind durch Emission, Photochemie und Transport bestimmt. Ziel der Arbeiten im Programm "Atmosphäre und Klima" ist ein quantitatives Verständnis der chemischen Umwandlungs- und Transportprozesse von Spurengasen und Aerosolen sowie der Bildung von Wolken. Die Arbeiten unterteilen sich in die beiden Programmenthemen "Spurenstoffe in der Troposphäre" und "Stratosphäre und Tropopausenbereich im globalen Wandel".

Die troposphärische Zusammensetzung beeinflusst über den Strahlungstransport in direkter Weise das Klima der Erde. Spurengase und Aerosole beeinflussen die Mikrophysik von Wolken und die Regenbildung und damit den Wasserkreislauf. Neben Klimaänderungen bestimmen sie die Luftqualität und Deposition von Schadstoffen, die auf den Menschen und die Biosphäre einwirken. Das Wissen über die Zusammensetzung und den Zustand der Troposphäre ist dementsprechend notwendig, um die Rolle der Troposphäre im Erdsystem und seine Wechselwirkung mit dem Klima zu beschreiben und vorhersagen zu können. Um das Ziel des Programmenthemas zu verwirklichen, werden Fragestellungen zur Chemie der Troposphäre und deren Wechselwirkung mit der Stratosphäre bzw. mit Pflanzen und Boden bearbeitet (Kooperationen innerhalb des Instituts). Dabei werden modernste Instrumente zur Messung von Spurenstoffen, u.a. von freien Radikalen (OH, HO<sub>2</sub>, RO<sub>2</sub>, NO<sub>3</sub>) entwickelt und betrieben. Die Instrumente werden im Feld zur Aufklärung von Chemie- und Transportprozessen, sowie zur Quantifizierung biogener und anthropogener Emissionen eingesetzt. In der Atmosphärensimulationskammer SAPHIR und der großen Aerosolkammer werden Gasphasenchemieprozesse unter kontrollierten Bedingungen untersucht, bzw. Bildungsprozesse und chemisch-physikalische Eigenschaften von Aerosolen erforscht. 1- bis 3-dimensionale numerische Chemie und Transport-Modelle (CTM) werden weiterentwickelt und für die Interpretation von Felddaten eingesetzt.

Im Mittelpunkt der Stratosphärenforschung stehen die stratosphärische Ozonschicht und deren Wechselwirkung mit Klimaänderungen. In der Tropopausenregion werden die Faktoren mit der größten Wirkung auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und somit auf das Klima untersucht: die Spurengase Wasserdampf und Ozon, sowie Aerosole und Wolken. Für die Untersuchungen werden Messgeräte für Forschungsflugzeuge (10 bis 20 km Flughöhe, z. B. GEOPHYSICA) und Forschungsballons (bis zu 40 km Flughöhe) entwickelt und im Rahmen internationaler Messkampagnen, z.B. in der Arktis oder den Tropen, eingesetzt. Langzeitbeobachtungen von Wasserdampf, Ozon und Stickoxiden werden von kommerziellen

Flugzeugen im Rahmen des europäischen Projekts MOZAIC durchgeführt. Die Auswertung sämtlicher Messdaten erfolgt in Kombination mit Computersimulationen der Erdatmosphäre (z.B. mit dem in Jülich entwickelten Atmosphärenmodell CLaMS). Diese Aktivitäten werden durch die Analyse von Satellitendaten der Atmosphäre (z.B. ENVISAT) und den Vorschlag neuer Satellitenmissionen (z.B. GLORIA) ergänzt.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### Programmthema 3: Spurenstoffe in der Troposphäre

Zielsetzung des Programmthemas ist das verbesserte Verständnis der chemischen Zusammensetzung und des physikalischen Zustands der Troposphäre sowie der dazu wesentlich beitragenden Prozesse. Die Arbeiten konzentrieren sich auf fünf Unterthemen.

##### (1) Langzeitmessungen von Spurenstoffen in der Troposphäre

Die Ergebnisse der im Rahmen der Qualitätssicherungsaktivität für die Global Atmosphere Watch der WMO durchgeführten Vergleichsmessungen von Ozonsonden wurden in zwei Publikationen dokumentiert. Die Ergebnisse zeigen, dass die verschiedenen ECC-Sonden um 5-10% abweichen. Auf dieser Basis entwickelte, harmonisierte Bedienungsvorschriften sind wichtig für die Analyse von Langzeitrends (M).

Mithilfe der mehrjährigen Messreihen von Ozon und Wasserdampf von Flugzeugen aus dem MOZAIC Programm wurde ein globales Chemie-Transportmodell evaluiert und untersucht, inwieweit das Modell die Unterschiede der luftchemischen Zusammensetzung in einzelnen Jahren wiedergeben kann. Die Ergebnisse zeigen, dass die Variabilität der Ozonkonzentration in der freien Troposphäre zu einem wesentlichen Teil durch großräumige dynamische Prozesse bestimmt wird, die das Modell zufriedenstellend abbilden kann. Allerdings zeigen MOZAIC Beobachtungen von Kohlenmonoxid auch Schwächen des vertikalen Transportes im Modell auf.

##### (2) Beitrag der Biosphäre zur chemischen Zusammensetzung der Troposphäre

Mit Hilfe der Einzelzweig-Einschlussmethode wurden über 2 nachfolgende Vegetationsperioden **Emissionsraten von Terpenen** der europäischen Buche bestimmt. Im Unterschied zu vorhergehenden Studien wurden sehr große Standardemissionsraten von 3,5 nmol m<sup>-2</sup>s<sup>-1</sup> für die Summe aller Terpene gefunden. Die Untersuchung der Saisonalität ergab keine messbaren Emissionen zu Beginn des Frühlings, obwohl die Blattflächen schon voll entwickelt waren und Temperatur und Licht deutliche Emissionen hätten erwarten lassen. Ein solches Verhalten wird mit den bisher entwickelten Emissionsalgorithmen nicht beschrieben und verfälscht die derzeitigen Emissionsinventare (M).

Acylnitrate werden als **Marker für den Abbau biogener Emissionen** herangezogen, z.B. MPAN für den Abbau von Isopren. In der **Atmosphärensimulationskammer SAPHIR** wurden Untersuchungen zur Reaktion von NO<sub>3</sub> mit Aldehyden und zur Reaktion von OH mit Isopren und dessen Abbauprodukten durchgeführt. Bei direkter Messung der NO<sub>3</sub>-Radikale in Reaktion mit Ethanal, Propanal, Butanal und Benzaldehyd zeigten sich für Benzaldehyd Abweichungen von Literaturwerten. Durch direkte Messung der Acylnitrate PPN, PBN und MPAN bei der Reaktion von OH mit Isopren wurde eine große Diskrepanz mit dem für die Auswertung herangezogenen Master Chemical Mechanism, der eine 2 bis 3 mal stärkere Konzentration von MPAN und PAN als transiente Abbauprodukte vorhersagt, gefunden (M).

Im Rahmen des ECHO-Projektes wurde der Einfluss der Vegetation auf Photolysefrequenzen im Wald und deren Höhenabhängigkeit untersucht. Die Ergebnisse zeigen für alle Photolysefrequenzen eine starke Abnahme auf typischerweise 2% am Waldboden im Vergleich zu den Werten oberhalb des Waldes. Die damit verbundene Verminderung der Konzentration von OH-Radikalen bedeutet, in Kombination mit Abschätzungen der Aufenthaltsdauern im Wald, einen praktisch quantitativen Eintrag biogener VOCs in die atmosphärische Grenzschicht, zumindest für die Hauptsubstanz Isopren (M). Dies wird untermauert durch numerische Studien mit einem hochauflösenden eindimensionalen Chemie- und Transportmodell.

##### (3) Wechselwirkung von Transport-, Mischungs- und chemischen Prozessen und deren Auswirkung auf den Abbau von Spurengasen

Das Luftschiff **Zeppelin NT** wurde als **Messplattform für atmosphärische Messungen** in der planetarischen Grenzschicht vorbereitet. Das Ziel ist die Untersuchung von chemischen und meteorologischen Prozessen in der unteren Troposphäre, die einen bedeutenden Einfluss auf die Luftqualität und das Klima haben (mit herkömmlichen Flugzeugen oder festen Bodenstationen nicht durchführbar) (M). Die Messkampagne **TRACKS** im Juli 2007 ist ein Beitrag der atmosphärisch-chemischen Forschung der HGF zum Schwerpunktprogramm 1167 der DFG (COPS, Convective and Orographically-induced Precipitation Study) (M).

Im Rahmen der internationalen Modellvergleichsstudie zum Ferntransport von Luftschadstoffen (TFHTAP) haben Jülicher Wissenschaftler mehrere Modellszenarien berechnet, in denen untersucht wurde, wie sich Emissionsänderungen in einer Region auf die Schadstoffkonzentrationen in anderen Regionen auswirken. Die Ergebnisse dieser Rechnungen sind (zusammen mit denen anderer Modelle) in einen vorläufigen Sachstandsbericht eingeflossen. Sie zeigen, dass Emissionsreduktionen außerhalb der jeweils betrachteten Zielregion zusammengekommen in etwa ähnlich viel bewirken wie Veränderungen innerhalb der Region mit dem gleichen Reduktionsfaktor. Außerdem bestätigen die Rechnungen die bedeutsame Rolle von Methan bei der Regulierung der globalen Hintergrundkonzentrationen von Ozon.

#### (4) Selbstreinigungsfähigkeit der Troposphäre und deren Wechselwirkung mit dem atmosphärischen Wandel

In den asiatischen Ballungsräumen um Beijing und im eher ländlich geprägten Pearl-River-Delta (PRD) wurden 2006 die internationalen Feldkampagnen CAREBEIJING und PRIDE-PRD2006 durchgeführt. Die Auswertung der Messungen im Pearl-River-Delta ergab sehr stark erhöhte OH-Konzentrationen, die sich mit den etablierten Vorstellungen über photochemische Prozesse nicht erklären lassen. Es konnte hier gezeigt werden, dass es in PRD einen dominierenden, bisher unbekanntem Rezyklierungsprozess für Hydroxylradikale OH geben muss, der die OH-Radikale nach ihrer Reaktion mit Schadstoffen wieder zurückbildet. Eine solche Rezyklierung erfolgt nach dem derzeitigen Verständnis der Photochemie ausschließlich durch NO. NO selbst konnte durch die Messungen aber ausgeschlossen werden. Die für den unbekanntem Prozess verantwortlichen Substanzen konnten bisher noch nicht identifiziert werden. In ihrer Konsequenz führen sie in PRD letztendlich zu einem stark beschleunigten Schadstoffabbau, ohne das dabei der sekundäre Luftschadstoff Ozon gebildet wird. Die für PRD gefundenen Ergebnisse sind wahrscheinlich auf andere biogen dominierte Gebiete übertragbar, in denen der größte Teil der globalen Kohlenwasserstoffemissionen stattfindet.

#### (5) Aerosolprozesse und deren Einfluss auf Strahlung, Wolkenbildung und Gasphasenchemie

Im Hinblick auf die Biosphären-Atmosphären-Wechselwirkung und deren Einfluss auf den indirekten Klimateffekt wurde die Bildung von Partikeln, aus Pflanzenemissionen in Simulationsexperimenten untersucht. Gegenstand waren Species borealer Wälder, in denen häufig Partikelneubildung beobachtet wird, und die sich mit Erderwärmung ausdehnen sollten. Dabei wurden einfache lineare Zusammenhänge zwischen der Konzentration der Emission borealer Bäume bezogen auf Kohlenstoff und der gebildeten Partikelmasse, sowie der gebildeten Partikelzahl nachgewiesen. Dieser funktionelle Zusammenhang in den Simulationsexperimenten vergleicht sich quantitativ mit Feldbeobachtungen in Finnland. Mit diesen Simulationsexperimenten haben wir ein exzellentes Werkzeug zur Vorhersage der Partikelbildung aus Pflanzenemissionen unter klimatisch veränderten Bedingungen zur Hand. (M).

Aus obigen Untersuchungen der Pflanzenemissionen wurde ein repräsentatives Gemisch von Monoterpenen und Sesquiterpenen für boreale Wälder abgeleitet, dass in der SAPHIR-Kammer im Hinblick auf Bildung und Alterung unter natürlichen Bedingungen untersucht wurde. Unter Herbstbedingungen werden SOA hauptsächlich durch Ozonolyse gebildet. Unter diesen Bedingungen altern SOA nur langsam und ihre hygroskopischen Eigenschaften verändern sich kaum in der Zeit. (M).

An der **Wolken- und Aerosolkammer AIDA** wurde bei Temperaturen 303-243K die Feuchteabhängigkeit der Ausbeute von sekundärem organischem Aerosol (SOA) aus der Ozonolyse von  $\alpha$ -Pinen bestimmt. Gleichzeitig wurde die Bildung von OH-Radikalen bestimmt und die Ausbeute an Pinonaldehyd untersucht). Die Ausbeute von SOA ist größer in Gegenwart von Wasser. Dieser Effekt ist am größten bei 253K. Auch die Ausbeuten an OH und Pinonaldehyd sind größer in den feuchten Fällen. Feuchteabhängige Bildung und temperaturabhängige Kondensation von Pinonaldehyd erklären zu 50-100% den wasserabhängigen Anteil der SOA Ausbeuten, einschließlich des Maximums bei 253K. Es wurde zum ersten Mal die Bildung von OH-Radikalen aus  $\alpha$ -Pinen Ozonolyse auch bei tiefen Temperaturen bis zu 243 K nachgewiesen. Mit Hilfe der Wasserabhängigkeit der Pinonaldehyd-, OH- und Pinonsäureausbeuten, konnte im Mechanismus der  $\alpha$ -

Pinenozonolyse das Verzweigungsverhältnis in stabilisierte Criegee-Zwischenstufen und in den direkten Zerfall angeregter Criegee-Zwischenstufen bestimmt werden. (M).

#### **Programmthema 4: Stratosphäre und Tropopausenbereich im globalen Wandel**

Schwerpunkte in diesem Programmthema sind die veränderliche stratosphärische Ozonschicht und Klima-Chemie-Wechselwirkungen. Dazu werden in der Tropopausenregion (UTLS) und in der Stratosphäre klimawirksame Spurengase wie Wasserdampf und Ozon, Aerosole, Polare Stratosphärenwolken (PSC) und Eiswolken (Zirren) untersucht. Der Ergebnisbericht ist in sechs Unterthemen eingeteilt.

##### (1) Stratosphären-Troposphären-Austausch einschließlich Transport aus der Grenzschicht

Die Vergleichbarkeit von Messungen aus Kampagnen mit Forschungsflugzeugen (SPURT) und den Langzeitmessungen von Linienflugzeugen (MOZAIC) wurde mit statistischen Methoden untersucht. Für die Schnittmenge vergleichbarer Messbedingungen aus beiden Projekten wurden folgende Ergebnisse für die obere Troposphäre und untere Stratosphäre erzielt: Für Ozon zeigen beide Projekte eine ähnliche Varianz auf nahezu allen Zeitskalen, d.h. zur Untersuchung auch der saisonalen Varianz sind gezielte regelmäßige Messphasen. Dies ist für Wasser wegen der hohen räumlichen und zeitlichen Varianz jedoch nicht mehr ausreichend. Die entwickelten Methoden sollen zukünftig dazu verwendet werden, Vergleiche zwischen singulären und klimatologischen Messungen und globalen Modellstudien durchzuführen und so Transport und Umwandlungsprozesse in der Tropopausenregion quantitativ besser zu verstehen.

##### (2) Wasserbudget in der oberen Troposphäre und Stratosphäre

Die Messungen in den Tropen aus den Vorjahren wurden zur Untersuchung der relativen Feuchte in und außerhalb von Wolken ausgewertet. Diese Daten ergänzen die früherer Messprojekte zu sehr niedrigen Temperaturen. Hier können z.T. sehr hohe Übersättigungen beobachtet werden, die mit bisherigen Theorien nicht vereinbar sind. Wegen der hohen Bedeutung solcher Prozesse auf die Cirrenbildung und das Klima wurde ein internationaler Laborvergleich zwischen den state-of-the-art Hygrometern, darunter auch denen des ICG-1, durchgeführt. Ziel der noch nicht abgeschlossenen Auswertung dieser Experimente ist, hierdurch mögliche experimentelle Unsicherheiten einzugrenzen und somit die Theoriebildung zur Eiskondensation mit hoher Genauigkeit zu fundieren.

##### (3) Nukleation, Wachstum und Sedimentation von Zirrus- und PSC-Partikeln

Zum weiteren Verständnis der unter (2) beschriebenen hohen Übersättigungen wurde ein neues mikrophysikalisches Prozessmodell am ICG-1 etabliert. Sensitivitätsstudien mit diesem Modell am Beispiel einer beobachteten sehr kalten (180-195 K) Cirruswolke zeigten, dass wesentlich weniger Eiskristalle entstanden sind als nach dem gängigen Eiskondensationsmechanismus erwartet wurden. Statistische Untersuchungen der Häufigkeiten von Eiskristallzahlen anhand von zwanzig Messflügen ergaben, dass niedrige Eiskristallzahlen bei kalten Temperaturen mit größter Häufigkeit zu finden sind. Aus einer Analyse der Zeitskalen der Mikrophysik in Eiswolken folgt weiter, dass die hohen Übersättigungen in kalten Eiswolken erklärbar sind durch diese niedrigen Eiskristallzahlen. Weiters Ziel ist, den Entstehungsmechanismus der kalten Eiswolken im Detail zu verstehen.

##### (4) Stratosphärisches Ozonbudget und dessen Beeinflussung durch den Klimawandel

Der Ozon-Verlust in der Arktis im Winter 2002/2005 wurde im Detail mit dem CLaMS Modell simuliert, der simulierte Ozon-Verlust zwischen 380-550 K erreichte  $69 \pm 21$  Dobson-Einheiten. Der arktische Winter 2002/2003 wurde untersucht; es wird gefunden, dass in diesem gestörten Winter der Ozon-Verlust, der durch Halogene getrieben wird, mit NO<sub>x</sub> getriebenen Ozon-Verlust in größeren Höhen erheblich überlappen kann. Dieser NO<sub>x</sub> getriebene chemische Ozon-Verlust kann die gleiche Größe wie der Halogen getriebene Ozon-Verlust erreichen. Der Halogen verursachte Ozon-Verlust wurde für diesen Winter als  $50 \pm 10$  Dobson-Einheiten im April quantitativ bestimmt. Der Kinetik des ClO-Dimerzyklus wurde, basierend auf einer Vielzahl der vorhandenen Labor- und Feldstudien umfassend neu analysiert. Es zeigt sich, dass ein gutes, konsistentes Prozessverständnis für den Zyklus bisher noch nicht erreicht ist.

## (5) Stratosphären-Klima-Wechselwirkungen, atmosphärische Kopplungen und Trends

Die Quasi-Zweijahres-Schwingung (QBO) der tropischen Winde beeinflusst Transportprozesse in der gesamten Stratosphäre und hat auch Rückwirkungen auf die Troposphäre. Es ist prinzipiell bekannt, dass die QBO durch tropische Wellen angetrieben wird, quantitativ besteht aber beträchtliche Unsicherheit. Aus Satelliten-Temperaturmessungen des SABER Instruments wurde für die Jahre 2002-2006 eine Gesamtübersicht der Wellenspektren aller tropischen Wellen (d. h. von Kelvin-Wellen, Rossby-Wellen, Rossby-Schwerewellen und mesoskaligen Schwerewellen) für die gesamte Stratosphäre abgeleitet. Die Wechselwirkung der Wellen mit der QBO prägt den verschiedenen Wellen Intensitätsmaxima auf, wobei die Lage der Maxima von der Ausbreitungsrichtung abhängt. Die ostwärts laufenden Kelvin-Wellen haben ihr Maximum unterhalb des Übergangs von Ost- zu Westwind, die westwärts laufenden Rossby-Schwerewellen unterhalb des Übergangs von West- zu Ostwind.

## (6) Unterstützende Maßnahmen: Beobachtungsdaten und theoretische Hilfsmittel

Die Langzeitmessungen im Rahmen von MOZAIC wurden weitergeführt. Im Rahmen von IAGOS wurden neue Geräte zur Messung von Ozon und Stickoxiden entwickelt. In einem Gemeinschaftsprojekt von FZJ und FZK wird das abbildende FTIR-Spektrometer GLORIA-AB zum Einsatz auf HALO entwickelt. Die Satellitenversion IMIPAS (= Imaging MIPAS) ist als Hauptinstrument der Erderkundungsmission PREMIER der ESA vorgesehen. Diese wurde von einem internationalen Konsortium unter maßgeblicher Beteiligung von FZJ und FZK vorgeschlagen und befindet sich zurzeit in einer Vor-Phase-A - Studie, die im Jahr 2007 wesentlich vorangetrieben wurde.

## **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

### Nachwuchs:

Zurzeit sind Doktoranden aus verschiedenen Ländern (Finnland, China, Spanien, Schweiz, Frankreich) beschäftigt. Durch den Anteil von Doktoranden aus Schwellenländern leistet ATMO auch einen wichtigen Beitrag zum "Capacity Building". Darüber hinaus haben die im FZJ tätigen Dozenten Vorlesungen und Kompaktkurse an den Universitäten Köln und Wuppertal gehalten und zu verschiedenen nationalen/internationalen Sommerschulen ( u.a. Kompaktkurs "Atm. Chemie und Dynamik", Jülich) wesentlich beigetragen.

### Vernetzung:

Nach dem erfolgreichen Abschluss des Helmholtz Impuls- und Vernetzungsfonds-Projekts "ENVISAT-Daten und deren Nutzung" hat das Programm sich mit großem Erfolg an der Ausschreibung der Virtuellen Institute der HGF beteiligt. FZJ-Wissenschaftler koordinieren momentan 2 Virtuelle Institute (IMACCO, ZTT) und sind an drei weiteren stark beteiligt (PEP, HALO, ACI). Darüber hinaus sind die laufenden Aktivitäten in internationale und nationale Forschungsverbünde (z.B. EU-Network ACCENT, EUROCHAMP) integriert.

Die wissenschaftlichen Arbeiten sind u. a. über die Querschnittsthemen "Megacities" und Earth Observing System (EOS) eng mit anderen im FB "Erde und Umwelt" enthaltenen Programmen, hier insbesondere mit P4 und P5, vernetzt.

### Chancengleichheit:

Die Beschäftigung von Frauen ist durch die Einrichtung von Kindertagesstätten wesentlich erleichtert worden. Frau Dr. Bärbel Vogel wird im Rahmen des Helmholtz Mentoring Programms gezielt gefördert. Das FZJ fördert außerdem die von Frau Astrid Kiendler-Scharr geleitete Nachwuchsgruppe "Stabile Isotope in Aerosolen".

### Drittmittleinwerbung:

Trotz der schlechteren Rahmenbedingungen für HGF-Einrichtungen war das FZJ auch im Jahr 2006 sehr erfolgreich. Neben den Erfolgen bei den Virtuellen Instituten der Helmholtz Gemeinschaft sind eine Reihe von Vorhaben bei DFG-Schwerpunktprogrammen (CAWSES, Transregio TR32, HALO) sowie bei EU-Integrated Projects (SCOUT-03, EUCAARI, AMMA, GEMS, MACC) und EU-STREPs (EUROHYDROS,

CITYZEN) bereits in Bearbeitung oder genehmigt worden. Darüber hinaus wurden Mittel von der Industrie (HELISA) eingeworben.

## **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

### Forschungsflugzeug HALO:

Das neue Forschungsflugzeug HALO soll im Jahre 2009 für den Einsatz in der Atmosphärenforschung zur Verfügung stehen. Zur Vorbereitung der Integration der FZJ-Instrumente fanden spezifische Gespräche zwischen Wissenschaftlern und Ingenieuren des FZJ und dem Flugbetrieb (FB) in Oberpfaffenhofen statt:

- zur Integration des AIRLIF-Instrumentes, in Kooperation mit MPI Mainz zu entwickeln, insbesondere hinsichtlich des Radikaleinlasses und dessen Strömungsverhalten und flugzeugspezifischer Anforderungen.
- zur Integration des GLORIA-AB Spektrometers, zu entwickeln in Kooperation mit FZK, in den entsprechend modifizierten belly pod, der für dieses zentrale Instrument mit Priorität entwickelt werden soll.
- zur Integration der Offenen Messzelle eines TDL-Hygrometers voraussichtlich an einem Durchbruch des Rumpfes, zu entwickeln in Kooperation mit Universität Heidelberg und FZK.
- zur Koordination der Strömungsrechnungen für Einlässe bei FB und FZJ

In Zusammenarbeit mit den Partnern für die HALO-Demo-Missionen, welche für die Jahre 2009/10 geplant sind, wurden die wissenschaftliche Zielsetzung und technische Umsetzung (Instrumentierung, Belegung und Gewichtsverteilung, Zulassung) ausgearbeitet und dem WLA vorgelegt. Für das FZJ sind dies die OMO Demomission, die FZJ gemeinsam mit MPI Mainz koordiniert, sowie die TACTS, Cirrus-ML und POLSTRACC Missionen.

## **Weitere Programmentwicklung**

Grundlage für die weitere Programmentwicklung bleiben die ursprünglich festgelegten wissenschaftlichen Ziele mit den zugehörigen Meilensteinen, deren Einhaltung aus heutiger Sicht ohne wesentliche Einschränkung bis 2009 erfolgen sollte. Eine grundlegende Änderung der Zielstellung und der Strategie von ATMO ist nicht vorgesehen; andererseits sind eine Reihe von Weiterentwicklungen bereits im Gange oder geplant.

Eine bedeutende Rolle für die zukünftigen Forschungsaktivitäten im Programm ATMO wird das neue Forschungsflugzeug HALO spielen, das sich gerade im Umbau befindet. Mit den Missionsvorbereitungen sowie den Entwicklungen neuer Instrumente ist bereits begonnen worden. Der Antrag auf Ausbauinvestitionen für HALO (FZK, FZJ, GFZ und DLR) wurde von der HGF genehmigt und die Förderung ist im Jahr 2007 angelaufen.

Ein sich künftig stärker entwickelnder Forschungsansatz sind Untersuchungen über die ökologischen Auswirkungen eines weiteren Ausbaus und der Optimierung der Biomasse-Produktion für energetische Zwecke. (z. B. geplante Helmholtz-Allianz "Sustainable BioEconomy").

Mit dem EU-Vorhaben IAGOS (Integration of routine aircraft measurements into a global observing system) ist ein wichtiger Schritt zur langfristigen Sicherung des MOZAIC- und des CARIBIC-Projekts als europäische Infrastruktur gelungen. Auf Einladung wurde ein Antrag beim European Strategy Forum for Research Infrastructures (ESFRI) eingereicht.

Große Messkampagnen: Im Frühjahr 2008 findet eine Ballonkampagne in den Tropen (Teresina, Brasilien) statt, bei der FZJ-Wissenschaftler offene Fragen bzgl. des Brombudgets in der oberen Troposphäre und Stratosphäre sowie die Einflüsse des Broms auf die Ozonchemie untersuchen werden.

# Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmathe-ma, -themen

- 2 Erde und Umwelt
- **2.4 Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung**
- 2.4.1 Funktionsanalyse von Böden, Sedimenten und Grundwasser
- 2.4.3 Stress und Anpassung: Pflanzen in einer dynamischen Umgebung

**Beteiligte Institute:** [ICG](#), [ZAT](#), [ZCH](#), [ZEL](#),

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Harry Vereecken, ICG, [h.vereecken@fz-juelich.de](mailto:h.vereecken@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlights

In mehreren Publikationen wurde die essentielle Rolle des neu entdeckten Lutein-Epoxid-Zyklus in der Kontrolle des photosynthetischen Energiestoffwechsels aufgeklärt. Die Verleihung des Helmholtz-Humboldt-Forschungspreises 2008 an Prof. Bassi (Verona) würdigt auch die hierzu durchgeführten Kooperationsarbeiten zwischen ihm und S. Matsubara (ICG-3).

*Matsubara, S.; Morosinotto, T.; Krause, H.; Selmann, M.; Winter, K.; Osmond, B.; Jahns, P.; Bassi, R., Photosynthesis Re-search 91 (2007) 2/3, 250 - 251*

*Matsubara, S.; Morosinotto, T.; Osmond, C. B.; Bassi, R., Plant Physiology 144 (2007), 926 - 941*

*Krause, H.; Matsubara, S.; Galle, A.; Selmann, M.; Kursar, T.; Jahns, K.; Winter, K., Photosynthesis*

*Research 91 (2007) 2/3, 256 Franco, A. C.; Matsubara, S.; Orthen, B., Tree Physiology 27 (2007), 717 - 725*

Als europäisch gefördertes "Spezifisches gezieltes Forschungsprojekt" betreibt das ICG-4 das Vorhaben BRIDGE (Background cRiteria for the Identification of Groundwater thresholds) und hat damit unmittelbar die Europäische Wasserpolitik und die Umsetzung der Anfang 2007 in Kraft getretenen europäischen Grundwasserrichtlinie unterstützt. Im Rahmen des BRIDGE-Projekts hat das ICG-4 gemeinsam mit dem BRGM (Bureau de Recherche Géologique de Minères, France) eine Methode entwickelt, um natürliche Hintergrund- und Schwellenwerte für das Grundwasser auf Europäischer Maßstabsebene abzuleiten.

*Wendland, F., A. Blum, M. Coetsiers, R. Gorova\*, J. Griffioen, J. Grima, K. Hinsby, R. Kunkel, A. Marandi, T. Melo, A. Panago-poulos, H. Pauwels, M. Ruisi, P. Traversa, J. Vermooten & K. Walraevens (2008) Environmental Geology (online publication).*

*Wendland, F., G. Berthold, A. Blum, P. Elsass, J.-G. Fritsche, R. Kunkel, R. Wolter (2008), Desalination 226, 160-168.*

*Kunkel, R., F. Wendland, S. Hannappel, H. J. Voigt & R. Wolter (2007), Water Science and Technology, 55 (3), 97-105.*

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Das Programm "Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung" (kurz: "Biogeosysteme") konzentriert sich auf die Dynamik, die Wechselwirkungen und die Anpassung von Schlüsselkompartimenten in Biogeosystemen an menschliche Aktivitäten und Umweltveränderungen. Landwirtschaftliche Systeme mit ihren Kompartimenten Boden, Wasser und Pflanzen sind von besonderem Interesse, aber es werden auch Kulturpflanzen in forstlichen und agroforstlichen Systemen und ihre Wechselwirkung mit der Umwelt betrachtet. Das Programm zielt auf eine Analyse der Sensitivität dieser wesentlichen Komponenten im Bezug auf Umwelt- und vom Menschen verursachte Einflüsse ab. Die identifizierten Sensitivitäten und daraus abgeleitete

Konzepte liefern eine wissenschaftliche Basis für die Korrektur und Regelung ungünstiger und nicht nachhaltiger Entwicklungen in Biogeosystemen. Hauptforschungsthemen sind die Erhaltung und Kontrolle von Bodenfunktionen und funktioneller Vielfalt sowie genetischer Ressourcen in Böden und die Funktion von Pflanzen unter sich verändernden Umweltbedingungen.

Das Programm trägt aktiv zur Helmholtz-Arbeitsgruppe "Biodiversität" bei. Im Jahr 2007 wurde unter Führung des Forschungszentrums Jülich mit dem Aufbau des Netzwerks terrestrischer Observatorien der Helmholtz-Gemeinschaft TERENO begonnen, an dem FZJ, FZK, GSF, UFZ und DLR beteiligt sind.

Das Programm "Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung" besteht aus drei Programmthemen: "Funktionsanalyse von Böden, Sedimenten und Grundwasser", "Genetische Ressourcen und funktionelle Vielfalt von mikrobiellen Gemeinschaften in räumlich strukturierten Biogeosystemen" und "Stress und Anpassung: Pflanzen in einer sich verändernden Umwelt" sowie der programmspezifischen Integrationsaktion PSIA, die sich mit "Boden-Pflanze-Atmosphäre-Wechselwirkungen in landwirtschaftlichen Biogeosystemen" befasst. Das Programmthema 2 wird von der GSF bearbeitet und deshalb hier nicht ausführlich behandelt.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### Programmthema 1: Funktionsanalyse von Böden, Sedimenten und Grundwasser (PT1)

##### WP1: Die Rolle von Natürlichem Organischem Kohlenstoff (NOM) in der Funktion von Böden, Sedimenten und Grundwasser in sich verändernden Umgebungen

Die Forschungsarbeiten lieferten Beiträge für das Erreichen folgender Meilensteine:

- Relate structure and function from molecular to system level (responsible structures involved in hydrophobic and enantioselective interactions)
- Quantification of the influence of management (tillage systems) and changing environments (increased carbon bonding) on NOM synthesis and degradation with respect to NOM pool stabilities and reactivities
- Joint structural and functional analysis of the mechanisms of xenobiotic interaction with soil constituents providing process understanding for predictive modelling of element cycles and fate of xenobiotics

In ungestörten Säulenversuchen wurde der Einfluss von Ernterückständen auf das Verlagerungs und Bindungsverhalten von Benazolin und Benzo[a]pyren untersucht. Bis auf die Ebene einzelner Aggregatfraktionen der Versuchsböden konnte die Wirkung der Ernterückstände auf das Immobilisierungs- und Remobilisierungsverhalten der Testsubstanzen nachgewiesen werden. Nach 22 Jahren war es möglich, gealterte radioaktiv-markierte Atrazinrückstände aus Bodenaggregatfraktionen durch Zugabe von speziellen Bakterien (*Pseudomonas* ADP), die Atrazin abbauen können, zu mineralisieren. Für das Herbizid Metribuzin konnte festgestellt werden, dass sich das Rückstandsverhalten in einem Latosolboden im langjährig unterschiedlichen Bodenbearbeitungssystem (mit und ohne wäsende Bearbeitung) deutlich unterschied. Die Rückstandsmenge von Metribuzin und/oder Metaboliten war in dem konventionell bearbeiteten Boden deutlich geringer.

Verschiedene chemische Bindungen des Herbizids Simazin, des Herbizidmetaboliten 2-Aminobenzothiazol (ABT) sowie des in der Schweinezucht gebräuchlichen Antibiotikums Sulfadiazin (SDZ) und funktionellen Gruppen der Bodenmatrix wurden mittels Festkörper <sup>15</sup>N-NMR identifiziert. Um die veränderten chemischen Verschiebungen in den Spektren besser interpretieren zu können, wurden darüber hinaus Modellverbindungen synthetisiert, die bestimmte Bindungen im Boden imitieren und so eine Aussage über den für einen bestimmten Bindungstyp zu erwartenden Verschiebungsbereich zu ermöglichen. Weiterhin dienten diese synthetischen "gebundenen Rückstände" zur Überprüfung und Kalibrierung von quantenchemischen Berechnungen, die zur Interpretation der <sup>15</sup>N-CPMAS Spektren herangezogen wurden.

*Schnitzler, F.; Lavorenti, A.; Berns, A. E.; Drewes, N.; Vereecken, H.; Burauel, P.; Environmental Pollution 2007, 147, 4-13.*

*Berns, A. E.; Schnitzler, F.; Drewes, N.; Vereecken, H.; Burauel, P., Environmental Toxicology and Chemistry 2007, 26, 2151-2157.*

*Liebich, J.; Schlöter, M.; Schäffer, A.; Vereecken, H.; Burauel, P., 2007. Degradation and humification of maize straw in soil microcosms inoculated with simple and complex microbial communities. Eur. J. Soil Sci., 58(1): 141-151.*

*Berns, A. E.; Bertmer, M.; Schäffer, A.; Meyer, R. J.; Vereecken, H.; Lewandowski, H.; The <sup>15</sup>N-CPMAS spectra of simazine and its metabolites - measurements and quantum chemical calculations, European Journal of Soil Science 2007, 58, 882-888.*

## WP 2: Experimentelle Methoden zum Verständnis und zur Quantifizierung der Wirkung von Heterogenität auf Boden/Grundwasserleiter und Sedimentfunktionen auf verschiedenen Skalen

Die Forschungsarbeiten lieferten Beiträge für das Erreichen folgender Meilensteine:

- operational MERIT and SIP imaging systems at the field scale
- Procedures to characterise subsurface flow and transport using data obtained during tracer tests with non-invasive imaging techniques and isotope techniques
- Tested empirical and conceptual models that link electrical properties and environmental stable isotope evaluations to hydraulic and physicochemical soil properties
- Models to predict transport of colloids (DOM) and living bacteria in soils

Mathematische Modelle und nicht-invasive Methoden wurden entwickelt, um Massenflüsse von Wasser, Kohlenstoff und Schadstoffen auf Feld- bis Hof- und Regionalebene vorherzusagen. Im Labormaßstab ist der Transport von Bakterien in Abhängigkeit von der Matrix und der metabolischen Aktivität der Bakterien untersucht worden (Gargiulo et al., 2007). Bedeutende Fortschritte wurden in der Entwicklung und Anwendung nicht-invasiver Methoden insbesondere auf dem Gebiet der elektrischen Widerstandstomographie, der spektral induzierten Polarisation zur Bestimmung von hydraulischen Eigenschaften und Transportstrukturen erreicht. Die Entwicklung von GPR-Verfahren (Ground Penetrating Radar) (Weihermüller et al., 2007), passive L-Band Radiometrie und Bodenfeuchtesensornetzwerke (Bogena et al., 2007) wurden weiter vorangetrieben. Das ICG-4 ist an dem Cal/Val Projekt der SMOS (Soil Moisture Ocean Salinity) Mission der ESA beteiligt. Gekoppelte Inversionsalgorithmen, die hydrologisches Prozessverständnis zur Inversion von geophysikalischen Messdaten anwenden, wurden entwickelt. Im Rahmen der Modellierungsaktivitäten koordiniert das ICG-4 das Virtuelle Institut INVEST, welches sich mit der inversen Modellierung terrestrischer Systeme beschäftigt.

*Gargiulo, G.; Bradford, S.; Simunek, J.; Ustohal, P.; Vereecken, H.; Klumpp, E. Environmental Science and Technology, 41 (2007) 4, 1265 - 1271*

*Bogena, H.; Huisman, J. A.; Oberdörster, C.; Vereecken, H. Journal of Hydrology, 344 (2007), 32 - 42.*

*Weihermüller, L.; Huisman, J. A.; Lambot, S.; Herbst, M.; Vereecken, H., Journal of Hydrology, 340 (2007), 205 - 216*

### **Programmthema 3: Stress und Anpassung: Pflanzen in einer sich verändernden Umwelt (PT3)**

#### WP1: Dynamik von Wachstum, Allokation und Stoffwechsel

Für das Jahr 2007 wurden im Programm keine expliziten Meilensteine für dieses WP festgelegt. Allerdings konnten bereits wesentliche Beiträge zu Meilensteinen geleistet werden, die 2008 zu erreichen sind:

- Gene des Kohlenhydrathaushalts wurden als Master-Gene identifiziert, welche die Dynamik des Wachstums steuern,
- erstmals wurden Wurzelsysteme und Speicherorgane in natürlichem Boden mittels Koregistrierung von MRI- und PET-Daten analysiert. Hiermit wurde die Grundlage zur Identifizierung von Struktur-Funktionsanalysen in Wurzelsystemen gelegt

Darüber hinaus wurden weitere Screening-Prozeduren für Wachstumsanalysen mit hohem Durchsatz entwickelt, die im neu gegründeten Jülich Plant Phenotyping Center (JPPC) eingesetzt werden.

Die Dynamik wachsender Blätter wird stark durch endogene Rhythmen gesteuert (siehe Fortschrittsbericht 2006). Im Berichtszeitraum wurde insbesondere untersucht, welchen Einfluss veränderte Kohlenstoffverfügbarkeit auf den Wachstumsrhythmus hat. In Wiese et al. 2007 konnten erstmals in der Modellpflanze *Arabidopsis thaliana* derartige Tagesgänge nachgewiesen werden, die von charakteristischen Basis-Spitze-Gradienten begleitet wurden. In derselben Arbeit konnte aber auch erstmals eine signifikante Phasenverschiebung der Wachstumsaktivität in transgenen Pflanzen mit verändertem Stärkemetabolismus beschrieben werden. Walter et al. 2008 zeigten erstmals, dass wachsende Blätter von Pflanzen mit induzierbarem Crassulaceen-Säurestoffwechsel - einem speziellen Photosyntheseweg, bei dem nachts CO<sub>2</sub> aufgenommen wird - parallel zur Änderung des Photosynthesewegs ihre Wachstumsrhythmik verschieben.

*Wiese, A.; Christ, M. M.; Virnich, O.; Schurr, U.; Walter, A., New Phytologist 174 (2007), 752 - 761*

*Walter, A.; Christ, M. M.; Rascher, U.; Schurr, U.; Osmond, B., Plant, Cell and Environment 31 (2008), 484 - 491*

Die Etablierung der Magnetresonanz-Bildgebung (MRI) und der Positronen-Emission-Tomographie (PET) im Additional Funding Projekt NIM erlaubte erstmals die Untersuchung von Wurzeln und unterirdischen Speicherorganen in natürlichem Boden. Exemplarisch wurden die Strukturen von Kohlenhydratspeicher (Zuckerrübe), Wasserspeichergewebe (Radieschen) und Maiswurzeln mittels MRI in 3D analysiert. Nach

Applikation von  $^{11}\text{C}$ -CO<sub>2</sub> an den Blättern zeigte sich, dass die Kohlenstoffverteilung in den Speicherorganen sehr charakteristische Sektoralitäten aufwies. Bei den Maiswurzeln wurden dynamische Unterschiede in der C-Verteilung in unterschiedliche Wurzelbereiche an aufeinander folgenden Tagen gemessen: Pflanzen sind offensichtlich in der Lage, Teile von Wurzelsystemen vorübergehend an- und auszuschalten. (Manuskript eingereicht). Das ICG-3 koordiniert das Virtuelle Institut Portable NMR (VI-P NMR; <http://www.portable-nmr.eu/>).

Um den Durchsatz von Pflanzen in Wachstumsanalysen weiter zu erhöhen wurden neue Screening-Methoden für Blatt- und Wurzelanalysen aufgebaut und eingesetzt. In Walter et al. 2007 konnte erstmals das System GROWSCREEN eingesetzt werden. Es wurde nachgewiesen, dass die Bestimmung der relativen Wuchsrate über diese Screening-Anlage zu deutlich höheren Nachweisempfindlichkeiten für Wachstumsveränderungen unter Stress führt. Darüber hinaus wurde ein Screening-System auf der Basis von Blattscheiben implementiert, das einen sehr hohen Durchsatz erlaubt (Publikation eingereicht).

Walter, A.; Scharr, H.; Gilmer, F.; Zierer, R.; Nagel, K. A.; Ernst, M.; Wiese, A.; Virmich, O.; Christ, M. M.; Uhlig, B.; Jünger, S.; Schurr, U., *New Phytologist* 174 (2007), 447 - 455

## WP2: Dynamische Wechselwirkungen zwischen Pflanzen und Umwelt

Auch für dieses Workpackage wurden keine expliziten Meilensteine für 2007 festgelegt, allerdings konnten hier ebenfalls wesentliche Fortschritte in Hinblick auf die Meilensteine für 2008 erbracht werden:

- spezielle Anpassungen von Wurzelsystemen von Lupinen an sehr Phosphat-arme Böden (proteoid roots) und die Exsudation von organischen Substanzen in den Boden wurden analysiert
- Emissionen von Monoterpenen und Methanol aus Pflanzen wurden bzgl. ihrer metabolischen Ableitung und ihrer Funktion in Pflanzen und auf ihren Einfluss auf die Chemie der Atmosphäre hin untersucht.

Sogenannte "Proteoid Roots" sind besondere Anpassungen bestimmter Pflanzen an sehr geringe Versorgung mit dem essentiellen Nährstoff Phosphat. In den Untersuchungen konnte erstmals ein Zusammenhang zwischen dem P-Status des Sprosses und der Exsudation von Citrat als Chelator in der Rhizosphäre nachgewiesen werden. Zudem konnte gezeigt werden, dass die Exsudationsraten von organischen Säuren in die Rhizosphäre bislang signifikant unterschätzt wurden.

Shane, M. W.; Lambers, H.; Gawthray, G.R.; Kuhn, A. J.; Schurr, U., *Plant and Soil* 304 (2008), 169 - 178

In Untersuchungen zur Rolle von Monoterpenen bei der Verringerung von Ozonstress (Fares et al. 2008) konnte gezeigt werden, dass die Aufnahmerate in geöffnete Stomata die Ozonflüsse dominiert. Allerdings konnte in speziellen Bedingungen eine Korrelation von Monoterpenen mit der Verringerung der Ozonexposition dargestellt werden. Als interessantes Modellsystem zur Analyse derartiger Fragen wurden gemeinsam mit Kollegen aus dem FZK Arabidopsis-Linien mit Isopren-Emissionen charakterisiert (Loivamäki et al. 2007).

Loivamäki, M.; Gilmer, F.; Fischbach, R. J.; Sörgel, Ch.; Bachl, A.; Walter, A.; Schnitzler, J.-P., *Plant Physiology* 144 (2007), 1066 - 1078

Fares, S.; Loreto, F.; Kleist, E.; Wildt, J., *Plant Biology* 10 (2008), 44 - 54

Methanol-Emissionen von oberirdischen Pflanzenorganen konnten nur zum geringsten Teil von unmittelbar assimiliertem Kohlenstoff hergeleitet werden. Die Untersuchungen (Folkers et al. 2008) weisen vielmehr auf signifikante Einträge aus dem Wurzelsystem hin. Ein weiterer signifikanter Beitrag ist mit dem Tagesgang des Blattwachstums korreliert (Hüve et al. 2007).

Folkers, A.; Hüve, K.; Ammann, C.; Dindorf, T.; Kesselmeier, J.; Kleist, E.; Kuhn, U.; Uerlings, R.; Wildt, J., *Plant Biology* 10 (2008) 1, 65 - 75  
Hüve, K.; Christ, M. M.; Kleist, E.; Uerlings, R.; Niinemets, Ü.; Walter, A.; Wildt, J., *Journal of Experimental Botany* 58 (2007) 7, 1783 - 1793

## WP3: Signalübertragung, systemische Reaktionen und pflanzliche Immunität

Dieses WP wird hauptsächlich vom HMGU (frühere GSF) bearbeitet. Im Rahmen der gemeinsamen Arbeiten im Virtuellen Institut Biotische Interaktionen (ViBi) wurden hierzu aber auch von Seiten des ICG-3 Beiträge geliefert.

Im Modellsystem *Nicotiana attenuata* konnten bereits in Jungpflanzen transiente Wachstumsreduktionen bei Verwundung und durch spezifische Signalsubstanzen (Fettsäure-Aminosäure-Derivate (FACs)) nach Fraß der *Manduca sexta* Larve charakterisiert werden. Diese Untersuchungen zeigen, wie Jungpflanzen unter dem Einfluss von spezifischen Signalstoffen bei Verwundung den Primär- und Sekundärmetabolismus dynamisch umsteuern.

Hummel, G. M.; Naumann, M.; Schurr, U.; Walter, A., *Plant, Cell and Environment* 30 (2007), 1326 - 1336

## PSIA: Boden-Pflanze-Atmosphäre-Wechselwirkungen in landwirtschaftlichen Biogeosystemen

In der "Programme Specific Integration Action" (PSIA) wurden die Arbeiten zur Interaktion von Boden-Pflanze-Atmosphäre fortgesetzt. In einem Review wurden grundlegende Ansätze zur Modellierung der Dynamik der Photosynthese unter fluktuierenden Lichtbedingungen analysiert (Nedbal et al. 2007). Als neue Methode zur Erfassung von Karten der Photosynthese-Kapazität konnte auf Basis der Kooperation mit dem Institute for Global Change Biology (Carnegie, Stanford) die Laser-Induced-Fluorescence-Transients (LIFT)-Methode etabliert werden (Pieruschka et al. 2007). Dr. Uwe Rascher wurde in die Mission Advisory Group des von der European Space Agency (ESA) geplanten Satellitenprojektes FLEX zur Erfassung von Chlorophyll-Fluoreszenz über Satelliten gewählt (Rascher 2007).

*Nedbal, L.; Cerveny, J.; Rascher, U.; Schmidt, H., Photosynthesis Research 93 (2007) 1/3, 223 - 234*

*Pieruschka, R.; Klimov, D.; Rascher, U.; Kolber, Z.; Berry, J., Photosynthesis Research 91 (2007), 318 - 319*

*Rascher, U., Photosynthesis Research 91 (2007), 293 - 294*

Desweiteren wurde das PARSWMS Modell, das die drei-dimensionale Wasserströmung und der Transport von gelösten Stoffen in Böden beschreibt, parallelisiert und auf Großrechner implementiert. Für die Parameterisierung von Modellen, die zur Risikoabschätzung der Verlagerung von Pflanzenschutzmitteln aus dem Boden in das Grundwasser benutzt werden, wurde ein Übersichtspaper geschrieben und Simulationsstudien durchgeführt.

*Hardelauf, H.; Javaux, M.; Herbst, M.; Gottschalk S.; Kasteel, R.; Vanderborght, J.; and Vereecken, H.; 2007. Vadose Zone Journal, (6) 255-259.*

*Vanderborght J.; and Vereecken H (2007). Vadose Zone Journal (6):29-52.*

*Vanderborght J.; and Vereecken H. (2007). Vadose Zone Journal (6):140-148.*

## Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)

### Vernetzung:

Auf Basis der **Helmholtz AG "Biodiversität"** wurden gemeinsame Experimente zwischen dem UFZ und dem FZJ (ICG-3, NWG Biodiversität; Dr. Vicky Temperton) im Rahmen des Projektes EVENT (Einfluss von Extremereignissen auf die Biodiversität) an der Universität Bayreuth begonnen.

Die AG "Ecosystem Dynamics" im FZJ (ICG-3) hat mit Förderung durch das **EU-Network of Excellence ACCENT** gemeinsam mit dem **EU-Projekt CARBOEUROPE** drei mehrwöchige Mess-Kampagnen mit dem Helmholtz-Programm "Atmosphäre und Klima" zu Austauschprozessen zwischen Vegetation und Atmosphäre durchgeführt.

Im Rahmen der Vorbereitung des Antrags zur **Helmholtz-Allianz "Sustainable Bioeconomy"** wurden mehrere Workshops mit Wissenschaftlern aus dem FB Energie (FZK, FZJ) und aus den Helmholtz-Programmen "Atmosphäre und Klima" (FZK, FZJ) sowie "Nachhaltige Nutzung von Landschaften" (UFZ) durchgeführt. Diese Gespräche wurden auch nach Ablehnung des Allianzantrags fortgeführt. Im Jahr 2008 wurde im Nachgang zu dieser Initiative der Helmholtz-Verbund Sustainable Bioeconomy als Koordinationsaktivität zwischen den FB Energie und dem FB Erde und Umwelt gegründet.

Im Sommer 2007 wurde das **Virtuelle Institut "Portable NMR (VI P-NMR)"** etabliert. Teilnehmende Gruppen sind neben dem ICG-3 (Phytosphäre) und dem ICG-4 (Agrosphäre) aus dem FZJ, die DLR (Luft- und Raumfahrtmedizin), die Universität Würzburg (Physik und Biotechnologie), die RWTH Aachen (Makromolekulare Chemie) und die Universität Wageningen, NL. Ziel ist das Design und die Entwicklung von tragbaren NMR-Geräten zur Bildgebung und nicht-invasiven Prozesserschaffung in Biologie, Bodenforschung, (Weltraum- und mobiler) Medizin und in der Geoforschung.

Die Mittel für die wissenschaftliche **Ausbauinvestitionsmassnahme "Terrestrial Environmental Observatories (TERENO)"** wurden für den Zeitrahmen 2008-2010 bewilligt. TERENO ist eine gemeinsame Initiative von DLR, HMGU, FZK, FZJ und UFZ. Ab 2008 werden die ersten Instrumentierungen (Wetterradar und Bodenfeuchtesensor-netzwerk) im Rur-Observatorium installiert.

### Drittmittel/ teilweise auch Technologietransfer:

- Das ICG-3 ist Projektpartner im PAKT-Projekt der Leibniz-Gemeinschaft zum Thema "Das Hyphennetzwerk arbuskulärer Mykorrhizapilze im Boden: Ein potentieller Schlüssel zum besseren Verständnis von Ökosystemen und zum Management gartenbaulich genutzter Böden". Koordinator des Projektes ist das Institut für Gemüse und Zierpflanzenbau (IGZ) der WGL in Grossbeeren.

- Aus dem BMBF-Projekt SAFEPIPE wurde ein Patent zu einem innovativen Strömungswächter auf Basis des Vorbilds von Strukturen pflanzlicher Wasserleitungssysteme generiert.
- Das ICG-3 ist Projektpartner im Projekt ‚GABI-Improve: Erhöhung der Stress-Resistenz, Ressourcen-Nutzungseffizienz und Produktivität von Nutzpflanzen durch Reduktion der Photorespiration‘. Koordinator ist die RWTH Aachen, Institut für Biologie 1.
- Zwei Industrieprojekte mit der Fa. Bayer zur Stressresistenz von Pflanzen wurden neu begonnen (ICG-3).
- " Das ICG-3 koordiniert das Virtuelle "Institut Portable NMR".
- Dr. Uwe Rascher (ICG-3) wurde in die Mission Assessment Group für das FLEX-Projekt der ESA berufen, in dessen Rahmen ein Fluoreszenz-Satellit zur Analyse von Pflanzenfunktionen etabliert werden soll (Earth Explorer - Programm).
- Das ICG-4 koordiniert das Virtuelle Institut "INVEST - Inverse Modellierung terrestrischer Systeme", welches für 3 Jahre bewilligt wurde.
- In 2007 wurde die DFG-Forschergruppe "Hydrogeophysics" bewilligt, die von Dr. Sander Huisman (ICG-4) geleitet wird.
- ICG-4 ist Projektpartner im EU-Projekt "DIGISOIL", welches sich mit der digitalen Kartierung von Böden beschäftigt.
- Dr. Andreas Kemna (ICG-4) hat einen W2-Ruf für das Fachgebiet "Angewandte Geophysik" an der Universität Bonn angenommen.

#### Nachwuchsförderung:

Die FZJ-Nachwuchsgruppe "Digitale Bildanalyse" unter Leitung von Dr. Hanno Scharf (ICG-3) wurde etabliert und hat ihre Arbeit aufgenommen.

#### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

##### Kompetenzzentrum für nicht-invasive Methoden (NIM)

Im Bereich der Hochfeld-Magnetresonanzbildgebung wurde das erste Abteil des ‚Green NMR House‘ fertiggestellt und der 4.7T/31 cm Ultra-Wide Bore Scanner in Betrieb genommen. Es wurden eine Reihe erfolgreicher Pilotexperimente abgeschlossen, auf deren Basis jetzt Wurzel/Bodeninteraktionen, Knospenentwicklung und Wasserstatus routinemäßig gemessen werden. Momentan wird die periphere Struktur weiter ausgebaut, um automatisierte Messungen inklusive Klima- und Lichtparameter zu ermöglichen. Mit dieser Anlage gelang es zum ersten Mal die Wasserverteilung in natürlichen ungestörten Bodenkernen mit Hilfe der SPI-Sequenz abzubilden. Die Arbeiten zur hochauflösenden Bildgebung der Wurzelverteilung, des Wurzelwachstums und der Änderung der Wasserverteilung im Wurzelraum wurden fortgesetzt, und zum ersten Mal weltweit gelang es, diese MRI-Bilder mit Positronen Emissions-Tomographie-Bildern (PlanTIS) zu kombinieren. Sie zeigt in bisher ungekannter Klarheit und Ortsauflösung den räumlich und zeitlich sehr variablen Transport von Photoassimilaten in ungestörte Wurzelsysteme dreier sehr unterschiedlicher Pflanzen. Die Versuche mit Deuteriumoxid (D<sub>2</sub>O) als Kontrastmittel für die Abbildung von Wasserflüssen und Diffusionsprozessen in Böden wurden fortgeführt. Die Methode der Diffusionstensorbildgebung wurde an ersten Pflanzensystemen etabliert und dient zur räumlich aufgelösten Untersuchung der Beweglichkeit von Wasser in Pflanzen und den umgebenden Bodenstrukturen. Die Qualität der entwickelten Niedrigfeld-NMR Magnetsysteme wurde durch zahlreiche Verbesserungen deutlich gesteigert. Weiterhin wurden durch Einrichtung des Virtuellen Instituts für Portable NMR Kooperationen mit der RWTH-Aachen, der Universität Würzburg und Wageningen, sowie der DLR aufgenommen. In einer konzertierten Aktion wurde die Anzahl der Magnetsysteme deutlich erweitert und auch die Entwicklung mobiler Spektrometer aufgenommen. Erste Messungen zeigen sowohl die prinzipielle Verwendbarkeit als auch noch zu beseitigende Probleme. Mit Hilfe des ZAT wurde ein NMR-Magnet zu Messung ganzer Bäume entwickelt und gebaut, der 2008 noch fertig gestellt werden wird. Das gekoppelte Boden-Wurzel-Modell R-SWMS wurde erweitert, so dass kleinskalige Druckgradienten an der Boden-Wurzeloberfläche in der Wasserströmungsgleichung richtig implementiert werden. Eine Sensitivitätsanalyse des Modells wurde durchgeführt und die sensitiven Boden und Wurzelparameter abgeleitet.

*B. D. Armstrong, M. D. Lingwood, E. R. McCarney, E. R. Brown, P. Blümler, S. Han (2008). Journal of Magnetic Resonance (191) 273-281.  
S. Anferova, V. Anferov, J. Arnold, E. Talnishnikh, M. A. Voda, K. Kupferschläger, P. Blümler, C. Clauser, and B. Blümich, (2007) Magnetic Resonance Imaging (25) 474-480.*

*T. Schröder, M. Javaux, J. Vanderborght, and H. Vereecken (2007), Vadose Zone Journal (6) 524-526.*

Die erste Bauphase im Rahmen der wissenschaftlichen **Ausbauinvestitionsmaßnahme "Bildgebendes MRI"** wurde im FZJ in 2007 mit der Installation von 2 MRI-Scannern (7.5 und 4.5 Tesla, vertikale

Orientierung) und der Inbetriebnahme des Green-NMR-House (Aufstellungsort der MRIs in pflanzenrelevanter Umgebung in einem speziellen Gewächshaus) fertig gestellt. In 2008 wird der 3. Scanner (1,5 Tesla, 40 cm, vertikal) installiert werden, die Vorarbeiten hierzu laufen.

## Weitere Programmentwicklung

Ende 2007 wurde im Hinblick auf die zweite Phase der programmorientierten Förderung (2009-2013) mit der Umsetzung der Ausbauinvestition "TERENO" begonnen. Zur Koordination der Forschungsaktivitäten wurden Koordinationsteams (KT) unter Beteiligung der involvierten Zentren sowie externer Experten im Bereich der Biodiversität, Klimatologie, Bodenforschung und Hydrologie eingerichtet. Die KT sollen die Instrumentierung der verschiedenen Standorte sowie die Ausrichtung der Forschungsaktivitäten begleiten.

Die geplanten Arbeiten in 2008 im Programmthema PT4.1 zielen darauf ab, die für 2008 gesetzten Meilensteine zu erfüllen. Insbesondere sollen die hydrogeophysikalischen und petrophysikalischen Methoden weiterentwickelt und deren Verknüpfung sowie der Einsatz und Weiterentwicklung von Remote Sensing Methoden und mathematischen Modellen realisiert werden, um skalenübergreifend Fluss- und Transportprozesse in Biogeosystemen zu verstehen. Diese Arbeiten sollen im Rahmen des 7. Rahmenprogrammes der Europäischen Union und insbesondere im Bereich der "Capacity building"-Aktivitäten platziert werden. PT4.1 ist aktiv bei der Beantragung eines Netzwerkes für hydrologische Observatorien im Rahmen der IEEE-Aktivitäten (Ho\_net) und ESFRI-Finanzierung (NOHA) beteiligt. Das Institut Agrosphäre ist maßgeblich an der Einrichtung eines Schwerpunktprogramms über das Thema "hydrologische Veränderungen in Deutschland" beteiligt. Darüber hinaus wird das neu aufgebaute FT-ICR-MS im Rahmen des Kompetenzzentrums Biospec wesentliche Beiträge zur Charakterisierung des gelösten organischen Kohlenstoffs in Böden beitragen. In der Kopplung mit LC-MSMS können analytisch schwerer fassbare meist polare organische Chemikalien und Biomoleküle detektiert und quantifiziert werden.

Die weiteren Arbeiten im PT4.3 im Jahre 2008 fokussieren sich auf die Erreichung der für das Jahr 2008 festgelegten Meilensteine. Darüber hinaus werden insbesondere die im Rahmen des Additional Funding Projektes "Nicht-invasive Methoden" (NIM) etablierten Methoden im Rahmen des Jülich Plant Phenotyping Centers (JPPC) zur Phänotypisierung von verschiedenen Genotypen unter definierten, aber auch definiert variablen Umweltbedingungen eingesetzt.

In der weiteren Programmentwicklung wird die Phänotypisierung von Kultur- und Modellpflanzen unter dynamischen Umweltbedingungen verstärkt werden. Hierzu sind derzeit auch Aktivitäten zur Bildung jeweils eines Netzwerkes in Deutschland, in Europa sowie eine institutionelle Einbindung in das National Phenotyping Centre Australia im Gange. Das Institut koordiniert hierzu im Rahmen der High Tech Strategie der Bundesregierung das Deutsche Phänotypisierungs-Netzwerk (DPN), in dem Einrichtungen der Helmholtz Gemeinschaft, der WGL, MPG und FhG gemeinsam mit Universitäten in einem nationalen Netzwerk verbunden werden sollen. Auch das über das 'additional funding' Projekt 'Competence Centre for Non-Invasive Methods (NIM)' finanzierte und 2008 fertiggestellte 'Green House Hochfeld NMR, das Virtuelle Institut Portable NMR und das Jülich Plant Phenotyping Center (JPPC) werden hierin eingebunden.

Die im letzten Jahr etablierte Tenure-Track-Nachwuchsgruppe "Mechanismen der Biodiversität" zur besseren Verknüpfung des PT4.3. mit den Arbeiten des Programms 5 im Vorgriff auf die zukünftige Kooperation in POF-2 hat gemeinsame Projektarbeiten aufgenommen (-> Projekt EVENT an der Universität Bayreuth).

Ein wichtiges Ziel ist auch die Einbindung des ICG-3 im 7. Rahmenprogramms der Europäischen Union. Der Institutsleiter des ICG 3 ist Mitglied im Steering Committee der Technologie-Plattformen "Plants for the Future" und "BioFuels" und außerdem Vizepräsident der European Plant Science Organisation (EPSO).

Im Rahmen der POF-2 werden die Aktivitäten der beteiligten Institute im Programm "Biogeosysteme" in einem neuen Programm "Terrestrische Umwelt" gemeinsam mit UFZ und HMGU weitergeführt. Im Laufe des Jahres 2007 wurde daher gemeinsam mit UFZ und HMGU in mehreren Workshops der neue Helmholtz-Programmantrag "Terrestrial Environment - Strategies for a sustainable response to climate and global change" vorbereitet, der aus dem derzeitigen Programm "Biogeosysteme" (FZJ, HMGU) und "Nachhaltige Nutzung von Landschaften" (UFZ) entwickelt worden ist. Die Jülicher Forschungsaktivitäten werden sich hierbei insbesondere auf Fragen der nachhaltigen Biomasseproduktion, von Chemikalien in der Umwelt und der Beobachtung und Modellierung terrestrischer Systeme fokussieren.

# Nachhaltige Entwicklung und Technik

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmathe-ma, -themen

- 2 Erde und Umwelt
- **2.6 Nachhaltige Entwicklung und Technik**
- 2.6.5 Systemanalyse und Technikfolgenabschätzung

**Beteiligte Institute:** [ICG](#), [IEF](#)

**Verantwortlich:** Dr. Peter Wiedemann, ICG, [p.wiedemann@fz-juelich.de](mailto:p.wiedemann@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)

---

## Highlight

Ergebnisse des BMBF-geförderten Projekts "Integration wissenschaftlicher Expertise in medienvermittelte öffentliche Diskurse" (INWEDIS), darunter eine international vergleichende Befragung von etwa 1.350 biomedizinischen Forschern aus Deutschland, Frankreich, Großbritannien, USA und Japan zu ihren Kontakten und Erfahrungen mit Massenmedien, wurden international auf einem eigenen Symposium "How Scientists Interact with the Media: An International Analysis" bei der AAAS Annual Conference 2007 in San Francisco vorgestellt. Weitere Projektpräsentationen erfolgten in einem von MUT durchgeführten interdisziplinären Workshop, an dem sowohl Natur- und Sozialwissenschaftler als auch Kommunikationspraktiker (Journalisten und Vertreter der Öffentlichkeitsarbeit von Wissenschaftsorganisationen) teilnahmen, sowie bei der Abschlussveranstaltung des BMBF-Programms "Wissen für Entscheidungsprozesse" in der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften. Das Projekt, das außer der Wissenschaftlerbefragung auch eine Befragung von Pressestellenleitern aus dem Wissenschaftsbereich, eine Medienanalyse sowie eine Befragung von politischen Entscheidungsträgern umfasst, hat zwei zentrale Erkenntnisse erbracht: den in allen untersuchten Ländern überraschend ähnlichen und hohen Stellenwert öffentlicher Kommunikation für individuelle Forscher wie für Wissenschaftsorganisationen, und die erhebliche Bedeutung medialer Wissenschaftskommunikation für das Verhältnis von Wissenschaft und Politik (siehe unten). Der Abschlussbericht des Projekts liegt inzwischen vor.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im vorigen Jahrhundert hat sich das Verhältnis zwischen Mensch und Natur grundlegend verändert. Weitaus stärker als je zuvor beeinflusst der Mensch das Leben auf der Erde. Als eine entscheidende Forderung an die moderne Gesellschaft wurde das Leitbild der Nachhaltigkeit formuliert. Seine Umsetzung erfordert ein verbessertes Verständnis des Systems Erde und der Wechselwirkungen zwischen Gesellschaft und Natur. Hieran arbeitet die Helmholtz-Gemeinschaft mit dem Forschungsbereich Erde und Umwelt. Das Ziel ist, die Folgen der Veränderungen von Erde und Umwelt so genau zu beschreiben, dass Politik und Gesellschaft vorausschauend steuern können.

Das Programm "Nachhaltige Entwicklung und Technik" im Forschungsbereich Erde und Umwelt führt dementsprechend Vorsorgeforschung zur Gestaltung von Technik und der mit dem Einsatz dieser Technik verbundenen Stoffströme durch. Hierbei wird technologische Entwicklung mit sozio-ökonomischer Systemforschung und interdisziplinärer Technikfolgenabschätzung verknüpft. Das Programm umfasst die 5 Programmathe-men "Schutz und Regenerierung von Wasserressourcen", "Prozesse für das

Kohlenstoffmanagement", "Energetische und stoffliche Verwertung von Abfällen", "Massenströme von Baustoffen" sowie "Systemanalyse und Technologiefolgenabschätzung".

Das Forschungszentrum Jülich bearbeitet im HGF-Programm "Nachhaltige Entwicklung und Technik" einen Programmanteil, der zum Programmthema "Systemanalyse und Technologiefolgenabschätzung" gehört. Dabei werden forschungsschwerpunktsübergreifend wissenschaftlich-technische Ansätze zur gesellschaftlichen Zukunftsvorsorge untersucht. Im Mittelpunkt stehen einerseits dringende Probleme als solche, die das Verhältnis von Technik, Umwelt und Gesellschaft betreffen, und andererseits auch deren Lösungsmöglichkeiten. Von den Arbeiten sind Beiträge zu einer nachhaltigen Gestaltung von Technik, Wirtschaft und Gesellschaft sowie zu einem konstruktiven Umgang mit gesellschaftlichen Konflikten zu erwarten. Damit werden der Politik und Wirtschaft wissenschaftlich begründete Entscheidungshilfen zur Verfügung gestellt.

Bei der Auswahl der Fragestellungen orientieren sich die Arbeiten sowohl an gesellschaftlichen Brennpunkten als auch an den im FZJ vertretenen Forschungsfeldern. Die Arbeiten konzentrieren sich auf technisch-ökonomische Analyse von Energiesystemen, Wasser und Informationsinfrastrukturen, auf Risikoabschätzungen sowie auf sozialwissenschaftliche Analysen von Prozessen der Entscheidungsfindung bei der Technikbewertung. Charakteristisch für die Untersuchungsgegenstände sind übergreifende systemische Zusammenhänge zwischen Wissenschaft/Technik, Umwelt und gesellschaftlichem Umfeld. Inter- und Transdisziplinarität gehören daher untrennbar zu Systemanalyse und zur Technologiefolgenabschätzung. Die Identifizierung von Stakeholdern und deren Beteiligung sind in vielen Feldern Teil der Arbeiten.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### TECHNISCH-ÖKONOMISCHE ANALYSEN

##### Energietechnik

Im Auftrag von BMU/UBA führte STE gemeinsam mit Partnern (DIW Berlin, ISI Karlsruhe) eine Untersuchung zu den Wirkungen des Klimaprogramms der Bundesregierung durch (Politikszenerarien IV). Die Studie zeigte, dass das im Rahmen des Burden-Sharing festgelegte CO<sub>2</sub>-Reduktionsziel von 21% erfüllt werden kann und dass es darüber hinaus weitere Minderungspotentiale gibt. Die Ergebnisse der Studie fließen in den Klimagasprojektionsbericht der Bundesregierung ein.

Im Rahmen des EDUARD-Projekts wurden im Auftrag des BMWi gemeinsam mit ZEW Mannheim Entscheidungskriterien für F&E-Förderung im Energiebereich entwickelt. Die Studie basiert auf innovationsökonomischen Ansätzen und konzentriert sich auf fossil befeuerte Kraftwerke und ausgewählte Technologien der Wärmeerzeugung. Für Kraftwerkstechnologien wurde gezeigt, dass vor allem die Kriterien "erwartete Profitabilität" und "(wirtschaftlich-technisches) Risiko/Unsicherheit" von zentraler Bedeutung für die Verbreitung von Technologien sind. Unter Berücksichtigung der Risikokaversion von Anlagenbetreibern führt insbesondere das Risikokriterium dazu, dass ein Techniklinienwechsel praktisch nicht vorkommt. Im Rahmen des HGF-Allianz-Wettbewerbs wurde das MEM-BRAIN-Projekt erfolgreich beantragt. MEM-BRAIN entwickelt Gas separierende Membranen, die für CO<sub>2</sub>- oder H<sub>2</sub>-Abtrennung eingesetzt werden können. STE leitet hier die Arbeiten zur Systemanalyse, die sich i.W. auf Fragen der Umweltwirkung von Herstellung und Einsatz der Membranen und der Verfügbarkeit von Materialien zur Membranherstellung konzentriert.

*Martinsen, D., Krey, V., Markewitz, P.: Implications of high energy prices for energy system and emissions - The response from an energy model for Germany. Energy Policy, 35 (2007), 4504-4515.*

*A. Schreiber, P. Zapp, W. Kuckshinrichs (2007): Environmental impacts of coal-fired power generation with amine-based carbon capture - A life cycle approach", in: CENERTEC (ed.) (2007): 4th European Congress Economics and Management of Energy in Industry", CD.*

##### Energiewirtschaft

Die von STE in 2006 aufgenommenen Arbeiten zur Untersuchung von netzbasierten materiellen Infrastrukturen unter besonderer Berücksichtigung demografischer Entwicklungen (Integratives Projekt InfraDem) wurden weitergeführt. Aufgrund des Ausscheidens des für den Wassersektor maßgeblichen Projektpartners wurde in 2007 der Fokus auf die Energieversorgung gelegt. Hier werden Beiträge zur Entwicklung von Grundprinzipien Nachhaltiger Entwicklung für das Management von materiellen Infrastrukturen ausgearbeitet. Neben der Analyse auf gesamtstaatlicher Ebene sind Hamburg und

Mecklenburg-Vorpommern als Modellregionen ausgewählt. STE arbeitet in InfraDem mit drei DLR-Instituten und dem Zentrum für Demografieforschung der Universität Rostock zusammen.

Im Rahmen der Untersuchung von europäischen Forschungsprogrammen wurden für Technologien zur Kohle- und Gasverstromung Untersuchungen zur Harmonisierung europäischer Förderinitiativen weitergeführt. Neben dem hier im Vordergrund stehenden deutschen COORETEC-Programm und dem englischen CATs-Programm wurden das niederländische CATO-Programm und das norwegische CLIMIT-Programm in den Mittelpunkt gestellt. Die für diese Programme durchgeführte vergleichende Analyse zeigt, dass die Themengebiete "Acceptance and communication of CCS" und "Economic modelling and strategy roll-out for CCS" erfolgversprechende länderübergreifende Kooperationen ermöglichen. Im Rahmen des FENCO-Projekts wurde hierfür ein Call mit vorbereitet.

*Kronenberg, T. (2007): Derivative Construction of Regional Input-Output Tables under Limited Data Availability, in: Bayar, Ali (ed.), Regional and Urban Modeling: Proceedings of the EcoMod Conference, Brussels, June 1-2, 2007, EcoMod Press, December 2007, Florence, MA, ISBN 0-9763295-1-4.*

*Kuckshinrichs, W.: European R&D Programmes for Carbon Abatement Technologies. Erscheint im Konferenzbericht der ENERDAY, Dresden University of Technology.*

## Klima- und Energiepolitik

Fortgesetzt wurde die Analyse der zentralen Randbedingungen eines nachhaltigen, globalen Klimaschutzregimes. Dabei richtet sich der Fokus auf die USA als einen Schlüsselstaat für den künftigen Klimaschutz. Thema der Analyse sind die politischen und gesellschaftlichen Triebkräfte der Klimapolitik im Kontext der 2008er Wahlen und die Strukturen des US-Energiesystems als Randbedingung. Die USA sind im Übergang zu einem nationalen "cap & trade"-Programm, obwohl eine Beteiligung an einem Post-Kioto-Protokoll wegen der Spezifika des politischen Systems offen bleibt. Auswirkungen der veränderten US-Politik auf die Klimapolitik der EU werden thematisiert.

Fortgeführt wurden die Arbeiten zu Operationalisierung nachhaltiger Entwicklung. Der Indicator for Sustainable Development (ISD), der Entwicklungen im Energiesektor mit messbaren Nachhaltigkeitsindikatoren beschreiben soll, wurde so weiterentwickelt, dass er auf das Drei-Säulen-Konzept der Nachhaltigkeit anwendbar wird.

Begonnen wurde der Aufbau des Forschungsfeldes Akzeptanz. Der Fokus wird dabei auf die Akzeptanzfragen gelegt, die für Carbon Capture and Storage relevant sind.

*H. Schlör, J.-F. Hake, W. Fischer: How sustainable is the German energy system? Introducing the Indicator for Sustainable Development (ISD) as a new measuring concept, in: International Journal of Green Economics, 2008, Vol. 2, No.1, pp. 1-28.*

## RISIKOABSCHÄTZUNGEN UND PROZESSE DER ENTSCHEIDUNGSFINDUNG

Die Arbeiten zu Risikoabschätzungen und zu Prozessen der Entscheidungsfindung bei der Technikbewertung sind strukturiert in die Bereiche **Umgang mit Unsicherheit, Öffentlichkeit, Politik und Massenmedien** sowie **Management von Innovationen**. Die Arbeiten konzentrierten sich programmgemäß auf das Themenfeld Gesundheit.

Im Bereich **Umgang mit Unsicherheit** liegt ein erstes Ergebnis des HGF-geförderten integrativen Projekt "Implications of Biomedicine for the Assessment of Human Health Risks" (IMBA, s. u.) vor, und zwar eine umfassende Bewertung der Kenntnislücken in der gentoxikologischen Forschung sowie in der tierexperimentellen und epidemiologischen Forschung zur Wirkung hochfrequenter elektromagnetischer Felder auf die Entwicklung von Hirntumoren. Aufbauend darauf wurde eine weltweite Experten-Delphi-Befragung durchgeführt, die als Basis zur Analyse des möglichen Beitrags toxikogenomischer Forschung zur Schließung dieser Kenntnislücken untersucht wird. Erste Teilergebnisse zu den Chancen der "Omics"-Forschung zeigen, dass deren bisherigen Beiträge für die Analyse undeutlicher Risiken keine Erkenntnisse erbracht haben, die über klassische gentoxische Verfahren hinausgehen.

Das aus dem HGF-geförderte Projekt NanoHealth (s. u.) untersucht die bislang wenig bekannten Wirkungen synthetischer Nanopartikel auf Mensch und Umwelt. Zur Zusammenfassung und Bewertung des derzeitigen wissenschaftlichen Erkenntnisstandes wurde die von MUT entwickelte Methode der Evidence Maps zur Evidenzbewertung möglicher gesundheitlicher Risiken weiterentwickelt und erfolgreich angewendet.

Seit Januar 2007 wird an dem EU geförderten Projekt "State of the art review of risk perception methodologies and empirical studies focused on risk from chemicals re-released from consumer products/articles" gearbeitet. Die beiden ersten Arbeitsschritte (1) Durchführung einer umfassenden Literaturrecherche zum Stand der Risikowahrnehmungs- und Risikokommunikationsforschung sowie (2) eine europaweite Befragung von Behörden, NGOs und Industrie zu diesem Thema wurden abgeschlossen.

Schütz, H.; Wiedemann, P. M.; Clauberg, M.\* (2007). *The public perception of precaution*. *EMBO Reports*, 8, 612 - 613. Vorhold, V.; Giessing, C.\*; Wiedemann, P. M.; Schütz, H.; Gauggel, S.\*; Fink, G. R. (2007). *The neural basis of risk ratings: Evidence from a functional magnetic resonance imaging (fMRI) study*. *Neuropsychologia*, 45, 3242 - 3250. Song, H.-R.\*; Kim, W.-J.\*; Cho, H.M.\*; Schütz, H. (2007). *Nano und schöne Mikrowelt (auf koreanisch)*. Seoul, Korean Studies Information Co.

Unter die Forschungsthemen **Öffentlichkeit, Politik und Massenmedien** fallen die Arbeiten zum mittlerweile abgeschlossenen, vom BMBF geförderten INWEDIS-Projekt. Hier wurde am Beispiel der Biomedizin die These belegt, dass die Medienorientierung der Politik wegen der notwendigen öffentlichen Legitimierung der Forschung eine "Medialisierung" der Wissenschaft bzw. ihrer öffentlichen Selbstdarstellung im Sinne einer (partiellen) Orientierung an medialen Kriterien zur Folge hat. Die Medialisierung der Wissenschaft wiederum schafft Einflusschancen der Wissenschaft auf die Politik und erhöht die Chance, dass wissenschaftliche Sichtweisen und Argumente in politischen Entscheidungsprozessen aufgegriffen werden. Die spezifischen "Leistungen" der Medien - im Vergleich zu formalen Verfahren direkter Politikberatung - liegen dabei in der politischen Kontextualisierung der Forschung, der mit medialer Aufmerksamkeit verbunden impliziten Relevanzzuweisung sowie der Herstellung von politischen Anschlussmöglichkeiten an öffentlich sichtbare wissenschaftliche Forschungsergebnisse. Die Ergebnisse legen nahe, dass Forschung mit dem Ziel politischer Beratung, wie z.B. TA, nicht nur auf direkte Beratung (z.B. Gutachten), sondern zur Erhöhung der Wirksamkeit parallel auch auf öffentliche Kommunikation Wert legen sollte. Die Studie basiert auf einer Analyse der Wissenschaftskommunikation durch eine internationale Befragung von Wissenschaftlern und Pressestellen wissenschaftlicher Organisationen, einer Medienanalyse sowie einer Befragung von Entscheidungsträgern aus dem politisch-administrativen System.

Peters, H. P.; Lang, J. T.\*; Sawicka, M.; Hallman, W. K.\* (2007). *Culture and technological innovation: impact of institutional trust and appreciation of nature on attitudes towards food biotechnology in the USA and Germany*. *International Journal of Public Opinion Research*, 19, 2, 191 - 220.

Peters, H. P.; Sawicka, M. (2007). *German reactions to genetic engineering in food production*. In: *The public, the media and agricultural biotechnology* / ed.: D. Brossard, J. Shanahan, T. C. Nesbitt. - Wallingford (UK): CABI Publishing, S. 57 - 96.

Peters, H. P.; Heinrichs, H.\* (2007). *Das öffentliche Konstrukt der Risiken durch Sturmfluten und Klimawandel*. In: *Land unter? Klimawandel, Küstenschutz und Risikomanagement in Nordwestdeutschland : die Perspektive 2050* / ed.: B. Schuchardt, M. Schirmer. - München, Ökom Verlag, S. 115 - 144.

Im Bereich **Management von Innovationen** wird seit September 2007 im BMBF-Projekt "Die personalisierte Medizin im Gesundheitssystem der Zukunft" am Beispiel der Demenz untersucht, wie neue Entwicklungen biomedizinischer Forschung die Früherkennung, Diagnose und Therapie multifaktoriell bedingter Erkrankungen verändern können und wie dies in Abhängigkeit unterschiedlicher gesellschaftlicher Zukünfte bewertet wird. Ziel ist es, anhand der Szenario-Methodik denkbare gesamtgesellschaftliche Entwicklungen auszuloten und Handlungsempfehlungen abzuleiten, die dazu beitragen können, Chancen einer personalisierten Medizin auszuschöpfen, mögliche Risiken aber zu minimieren.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

In Zusammenarbeit mit dem IEA Greenhouse Gas R&D Programme wurde im August 2007 von STE eine internationale Summer School zum Thema "Carbon capture and storage" in Kloster Seeon durchgeführt. Darauf aufbauend wurden in 2007 unter Federführung eines kanadischen Partners Planungen für eine nachfolgende Veranstaltung in 2008 in Kanada aufgenommen. Doktoranden der STE waren darüber hinaus beteiligt am Student Chapter der GEE (Gesellschaft für Energiewissenschaft und -politik) in Düsseldorf am Zentrum für Innovative Energiesysteme und am Jugendprogramm des 20. World Energy Congress in Rom.

Unter Federführung vom Institut für Energieforschung, FZ Jülich, wirkte STE mit an Konzeption und Beantragung des MEM-BRAIN-Projekts zu "Gasseparationsmembranen für emissionsfreie fossile Kraftwerke". Das Allianz-Projekt wird ab 2008 aus dem Impuls- und Vernetzungsfonds der HGF finanziert.

Seit Mai 2006 wird mit dem HGF-geförderten integrativen Projekt Implications of Biomedicine for the Assessment of Human Health Risks (IMBA, Laufzeit 3 Jahre) untersucht, wie neue Entwicklungen in der biomedizinischen Forschung (Genomics, Proteomics etc.) die Rahmenbedingungen des Managements von Gesundheitsrisiken verändern werden.

Unter Federführung von MUT arbeiten zwei Helmholtz-Zentren (FZJ und MDC) und fünf externe Partner zusammen. Zu IMBA tragen eine Reihe von Disziplinen bei (Risikoanalyse, Strahlenbiologie, Toxikologie, Genetik, Bioethik sowie Sozialwissenschaften), die bislang aufgrund der HGF-Programmstruktur keine gemeinsamen Forschungsziele verfolgten.

MUT ist außerdem an dem ebenfalls aus dem HGF Impuls- und Vernetzungsfonds geförderten Projekt "Nanotechnology and Health. Technology options, risk evaluation and precautionary strategies (NanoHealth, Laufzeit 3 Jahre)" beteiligt, das von ITAS/FZK koordiniert wird.

### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

An dem HGF-Additional Funding Projekt "CO<sub>2</sub>-Abtrennung bei fossilen Kraftwerken" sind die FZJ-Institute bzw. -Einrichtungen IWV, ZAT sowie STE beteiligt. Ziel des Vorhabens ist die Membranentwicklung und -herstellung für geeignete CO<sub>2</sub>-Abscheideverfahren in Kraftwerksprozessen. Im Rahmen der ökologischen Bilanzierung ausgewählter Techniken auf der Basis des Lebenszyklus-Ansatzes konnte gezeigt werden, dass durch die beabsichtigte Reduktion von CO<sub>2</sub>-Emissionen auf der Basis von MEA-Lösungen z.T. andere Umweltwirkungen in Kauf genommen werden müssen. Die Arbeiten zum Überzeichnungsvorhaben wurden unter Federführung des IEF1 in einem Allianzvertrag zum Thema "Gasseparationsmembranen für emissionsfreie fossile Kraftwerke" überführt.

## **Weitere Programmentwicklung**

### TECHNISCH-ÖKONOMISCHE ANALYSEN

Die zentralen Forschungsthemen sind Identifikation grundlegender Kriterien, Indikatoren und Maßnahmen zur Operationalisierung des Leitbilds Nachhaltige Entwicklung, Entwicklung von Bewertungsverfahren und deren Erprobung im Themenfeld Energie.

Für die Abscheidung und Lagerung von CO<sub>2</sub>, aber auch für weitere technologische Konzepte, werden energietechnische/-wirtschaftliche Indikatoren entwickelt und erprobt. Für das Thema Vehicle-to-grid wurden dazu erste Arbeiten aufgenommen. Darüber hinaus wird insbesondere der Analyse von sozio-ökonomischen Aspekten Rechnung getragen wie z.B. der öffentlichen Akzeptanz von CCS-Techniken. Abgerundet wird das Themenfeld durch die Mitwirkung in internationalen Initiativen im Rahmen der IEA-Implementing Agreements Clean Coal Centre, Greenhouse Gas Technology R&D und auch Hydrogen sowie des Carbon Sequestration Leadership Forums (CSLF).

### RISIKOABSCHÄTZUNGEN UND PROZESSE DER ENTSCHEIDUNGSFINDUNG

Die zentralen Forschungsthemen sind Identifikation, Bewertung und Kommunikation von Chancen und Risiken mit besonderem Bezug zum Forschungsprogramm Gesundheit der HGF.

In zwei HGF-Projekten werden die Arbeiten zu Auswirkungen neuer molekularbiologischer Methoden ("Omics"-Methoden) auf qualitative und quantitative Risikoabschätzungen weitergeführt (IMBA), ebenso die Untersuchungen zur Evidenzcharakterisierung bei Risikoabschätzungen (NanoHealth). Verfahren zur Kommunikation von Unsicherheiten werden experimentell validiert. Dazu erscheint 2008 eine Buchpublikation bei Wiley: The Role of Evidence in Risk Characterization. Making Sense of Conflicting Data. Darüber hinaus wird ein internationaler Workshop mit zirka 40 Wissenschaftlern zum Thema "Omics for assessing unclear risks" vom 26-28.5 2008 in Berlin durchgeführt.

In Fortführung des EU-Projekts "State of the art review of risk perception methodologies and empirical studies focused on risk from chemicals released from consumer products/articles" wird ein Design für eine Eurobarometer-Studie entwickelt.

Das BMBF-Projekt zur personalisierten Medizin im Gesundheitssystem der Zukunft wird fortgesetzt. In Szenarioworkshops werden gesamtgesellschaftliche Zukunftsszenarien einer solchen Medizin entwickelt. Vor- und Nachteile unterschiedlicher Verfahren der Szenarien-Entwicklung werden in begleitenden Studien analysiert.

Die Schnittstelle Wissenschaft-Medien wird in den beiden biomedizinischen Forschungsfeldern Stammzellforschung und Epidemiologie untersucht, wobei auch die Frage der Generalisierbarkeit auf andere Forschungsfelder behandelt wird. Themen sind (1) Wissenschaft als "Gegenstand" und als Akteur im Prozess gesellschaftlicher Meinungsbildung sowie (2) Formen, Defizite und Rückwirkungen der Anpassung der Wissenschaft an die Erfordernisse gesellschaftlicher Kommunikation.

# Eingriffe des Menschen in Biogeosysteme in sensiblen Regionen

Programmungebundenes Vorhaben

- keine HGF-Zuordnung

Beteiligtes Institut: [ICG](#)

Verantwortlich: Prof. Dr. U. Schurr, ICG, [u.schurr@fz-juelich.de](mailto:u.schurr@fz-juelich.de)

## Highlight

Zum Yangtze-Projekt wurden unter Federführung der Projektgruppe China von den beteiligten Forschungszentren und Universitäten 23 Projektanträge in vier Projektbereichen erarbeitet und im Juli 2006 dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) vorgelegt. Aus Gründen der formalen Zuordnung wurden seitens der deutschen Partner 14 Anträge im Laufe des Jahres 2007 modifiziert. In enger inhaltlicher und organisatorischer Abstimmung mit dem Forschungszentrum Jülich und auf Grundlage der mit den deutschen Partnern verabredeten Forschungsschwerpunkte haben auch chinesische Partneereinrichtungen ihre Antragsunterlagen unter Federführung der Staatlichen Drei-Schluchten-Kommission (TGPCC) ab Herbst 2006 bei dem chinesischen Ministerium für Forschung und Technologie (MOST) eingereicht. Zwischenzeitlich sind auf deutscher Seite vier Antragstellern Projektmittel für dreijährige Forschungsarbeiten bewilligt worden. Neun chinesische Universitäten und Forschungseinrichtungen haben erste finanzielle Mittel zur Durchführung von vornehmlich wasser- und vegetationsbezogenen Arbeiten von MOST und TGPCC erhalten. Dabei ist für die chinesischen Partner entscheidend, dass sie jeweils auf die bestätigte Zusammenarbeit mit einer deutschen Einrichtung verweisen können.

## Ziele

Das Vorhaben dient der Untersuchung von Biogeosystemen, die in besonderer Weise von Eingriffen des Menschen betroffen sind. Zurzeit gibt es drei konkrete Forschungsprojekte, die auf der in Jülich praktizierten, vernetzten Umweltforschung aufbauen: (1) Nachhaltige Bewirtschaftung des neu geschaffenen Ökosystems am Drei-Schluchten-Staudamm in China (Yangtze-Projekt), (2) Untersuchungen der Luftqualität in Kuwait und (3) Entwicklung von Methoden zur Erfassung kleinskaliger Austauschprozesse in Gebieten mit heterogenen Landoberflächen (z.B. gleichzeitige landwirtschaftliche und industrielle Nutzung). Während die ersten beiden Projekte eher anwendungsorientiert sind, handelt es sich bei dem dritten Projekt um grundlagenorientierte Forschung.

Bis zum Jahr 2009 soll das **Drei-Schluchten-Staudammprojekt** in China am Yangtze fertig gestellt sein mit einem Staubeereich von über 600 km Länge und einer geplanten jährlichen Schwankung des Wasserspiegels um bis zu 30 Meter. Das Forschungszentrum Jülich und die Staatliche Drei-Schluchten-Kommission in Peking als federführende Institutionen haben vereinbart, die Arbeiten der rund dreißig Forschungspartner zu den Auswirkungen des Staudamm-Projekts auf Hydrosphäre, Biosphäre, Geosphäre und Atmosphäre sowohl im unmittelbaren Bereich des neuen Wasserreservoirs als auch in weiter entfernt gelegenen Gebieten zu koordinieren und durchzuführen.

Im Mittelpunkt der aktuellen Arbeiten des Projekts **Luftqualität in Kuwait** steht der Siedlungsraum Al Sabah südlich von Kuwait Stadt. Al Sabah ist ein Wachstumsgebiet mit derzeit 25.000 Einwohnern, die größtenteils aus Kuwait Stadt zugezogen sind. Da die Einwohner sich über die zunehmende Geruchsbelästigung

beklagen, wurde vom Parlament eine Untersuchung der Luftqualität angeordnet, bei der aufgeklärt werden soll, in wieweit staatliche Einrichtungen zur schlechten Luftqualität beitragen. Das ICG hat daraufhin in Zusammenarbeit mit KISR (Kuwait Institute of Scientific Research) ein detailliertes Spurengasmessprogramm durchgeführt und dann innerhalb des Virtuellen Instituts IMMACO ein Luftqualitäts- und Vorhersagemodell bei KISR implementiert.

Im Projekt **Erfassung kleinskaliger Austauschprozesses in Gebieten mit heterogenen Landoberflächen** soll die raum-zeitliche Dynamik pflanzenvermittelter Austauschprozesse im System Boden-Pflanze-Atmosphäre in dicht besiedelten und stark heterogenen Landschaften untersucht werden. Zunächst werden durch neue optische Fernerkundungsverfahren, sowie flugzeuggestützten Flussmessungen quantitative Daten über biogene Stoffflüsse (insb. CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O) erhoben. Diese Daten bilden anschließend die Grundlage, um in einem interdisziplinär arbeitenden Forschungsprojekt (SFB Transregio TR32: Köln, Bonn, Jülich, Aachen) Modellbetrachtungen für die Stoffbilanz in größeren Gebieten zu erweitern und mit mechanistischen Kausalbeziehungen zu verbessern.

Die Projektgruppe China im ICG führt die wissenschaftlichen Projekte im Forschungszentrum Jülich gemeinsam mit den Teilinstituten ICG-3 und ICG-4 des ICG und der Zentralabteilung für Chemische Analysen (ZCH) durch. Das Gesamtvorhaben wird in Abstimmung mit dem BMBF und dem MOST in das Rahmenabkommen über die Wissenschaftlich/Technische Zusammenarbeit zwischen der Volksrepublik China und der Bundesrepublik Deutschland eingebunden.

Die Untersuchungen zur Luftqualität in Kuwait werden federführend vom ICG-2 durchgeführt. Bei Ausbau der Aktivitäten spielt das Virtuelle Institut IMACCO (Inverse Modelling of the Atmospheric Composition) eine wichtige Rolle, an dem die EURAD-Gruppe der Universität Köln sowie das ICG-1 beteiligt sind.

Die Arbeiten zur Entwicklung von Methoden zur Erfassung kleinskaliger Austauschprozesse in Gebieten mit heterogenen Landoberflächen bauen auf Messkampagnen von ICG-2, ICG 3, und ICG-4 auf. Die Arbeiten sind eingebunden in ein interdisziplinär arbeitendes Netzwerk bestehend aus Meteorologen, Klimatologen, Hydrologen, Bodenkundlern und Pflanzenphysiologen und werden von der DFG innerhalb des Transregio SFB/TR32 "Patterns in Soil-Vegetation-Atmosphere Systems monitoring, modelling and data assimilation" gefördert. Am Transregio 32 sind die Universitäten Bonn, Köln und Aachen sowie das Forschungszentrum Jülich beteiligt.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

Zum Yangtze-Projekt wurden unter Federführung der Projektgruppe China von den beteiligten Forschungszentren und Universitäten 23 Projektanträge in vier Projektbereichen erarbeitet und im Juli 2006 sowie während des Jahres 2007 in organisatorisch modifizierter Form dem Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) vorgelegt. In enger Abstimmung mit dem Forschungszentrum Jülich und den deutschen Partnern haben auch chinesische Partneereinrichtungen ihre Antragsunterlagen unter Federführung der Staatlichen Drei-Schluchten-Kommission bei dem chinesischen Ministerium für Forschung und Technologie (MOST) und der Staatlichen Drei-Schluchten-Kommission (TGPCC) eingereicht. Auf deutscher Seite konnten vier Universitätspartner, die gemeinsam im Themenbereich "Landnutzungswandel / Erosion / Massenbewegungen" forschen, eine Förderung erlangen. Neun chinesische Partner haben bislang eine Förderung durch MOST und TGPCC erhalten. Für die Jahre 2008/2009 hat das Forschungszentrum Jülich die finanziellen Mittel zur Durchführung von insgesamt vier bilateralen Workshops eingeworben.

Eine zweiwöchige Umweltsommerschule, in der über die nachhaltige Nutzung der natürlichen Ressource Wasser sowohl im Rahmen wissenschaftlicher Vorträge als auch an Praxisbeispielen in Labor und Technik ausführlich diskutiert wurde, führte in den Jahren 2006 (Jülich) und 2007 (Shanghai) jeweils zehn Doktoranden aus afrikanischen Staaten, aus China und aus Deutschland zusammen. Die Initiative hierzu ging vom Forschungszentrum Jülich und der Tongji Universität Shanghai aus. Für das Jahr 2009 ist die Folgeveranstaltung in Nairobi (Kenia) geplant.

Im Rahmen der Arbeiten des DFG Transregios TR32 wurden in 2007 und 2008 unter der Leitung des ICG-2, ICG-3, und ICG-4 erfolgreich Messkampagnen in der Region um Jülich durchgeführt. Im Rahmen dieser Messkampagnen wurden bodengestützte Messungen der pflanzenvermittelten Austauschprozesse verbunden mit flugzeuggestützten Flussmessungen. Erste Ergebnisse sind viel versprechend und die

Messkampagnen wurden im Transregio als erfolgreich bewertet. Neben dem zu erwartenden wissenschaftlichen Erfolg wurden zahlreiche Informationsveranstaltungen in Zusammenarbeit mit der Pressestelle des Forschungszentrums initiiert und z.B. ein Magazinbeitrag für den WDR aufgenommen und gesendet, Radiointerviews gegeben und Informationsveranstaltungen in der Region organisiert. Die beteiligten Forscher des Forschungszentrums haben die ersten Ergebnisse auf zahlreichen Tagungen vorgestellt und wurden zu Vorträgen in der Region geladen. Das vielseitige Interesse bestätigt unsere Einschätzung, dass es sich hierbei um ein sichtbares und erfolgreiches Projekt handelt.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Die vielschichtigen Fragestellungen beim Yangtze-Projekt verbinden Inhalte der HGF-Programme 1, 2 und 4 im Forschungsbereich "Erde und Umwelt" miteinander. Die Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses unterstützt das Forschungszentrum durch insgesamt fünf Doktorandenstellen. Durch den Deutschen Akademischen Austauschdienst werden im Rahmen des Gesamt-Projekts Stipendien für 15 chinesische und vier deutsche Doktoranden und Nachwuchswissenschaftler bereitgestellt

## **Weitere Vorhabensentwicklung**

- Koordination und Durchführung der Arbeiten in den Projektbereichen Schadstoff/ Wasser/ Sediment; Vegetation/ Biodiversität; Erosion/ Massenbewegungen und Atmosphäre
  - Anleitung und Betreuung von chinesisch/deutschen Promotionsarbeiten
  - Wissenschaftleraustausch zwischen Einrichtungen in China und Deutschland
  - Umwelt-Sommerschule über die "Nachhaltige Nutzung natürlicher Ressourcen" gemeinsam mit der Tongji Universität in Shanghai
  - Erfassung kleinskaliger Austauschprozesses in Gebieten mit heterogenen Landoberflächen (in Zusammenarbeit mit Programm 4)
  - flugzeug- und bodengestützte Experimente zur Bestimmung der Saisonalität von CO<sub>2</sub>- und Wasserdampf-Konzentrationen und -Flüssen in der Jülicher Börde
  - Ergänzende spektral hochaufgelöste Reflektionsmessungen zur Charakterisierung der Vegetation und zur Beschreibung kleinräumiger biologischer Aktivität
  - Messung geeigneter anthropogener Spurengase als Tracer zur Quantifizierung der Beiträge anthropogener Emissionen zur CO<sub>2</sub>-Bilanz
-

# Funktion und Dysfunktion des Nervensystems

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- ve3 Gesundheit
- **3.3 Funktion und Dysfunktion des Nervensystems**
- 3.3.1 Signalwege und -mechanismen im Nervensystem
- 3.3.2 Methoden zur Bildgebung im lebenden Hirn
- 3.3.3 Pathophysiologische Mechanismen bei neurologischen und psychiatrischen Erkrankungen

**Beteiligte Institute:** [INB](#), [ZEL](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Karl Zilles, INB, [k.zilles@fz-juelich.de](mailto:k.zilles@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlight

### Modell einer synaptischen Verbindung

Auf der Basis von In-vitro- und In-vivo-Daten wurde ein mathematisches Modell einer synaptischen Verbindung in einer kortikalen Kolumne, der kleinsten informationsverarbeitenden Einheit des Neokortex erstellt. Dies ist ein erster Schritt in der Beschreibung, wie ein neuronales Netzwerk eingehende sensorische Signale darstellt. *Sarid L, Bruno RM, Sakmann B, Segev I, Feldmeyer D (2007) Modeling a L4-to-L2/3 module of a single column in rat neocortex - interweaving in vitro and in vivo experimental observations. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 104: 16353-16358*

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Ziel dieses Programms ist es Signalwege und -mechanismen im normalen und durch Erkrankungen veränderten Nervensystem durch Analyse der molekularen, zellulären und systemischen Mechanismen besser zu verstehen. Hierbei wird eine Forschungsstrategie verfolgt, die Grundlagenwissenschaft im adulten und sich entwickelnden Nervensystem mit der Entwicklung neuer physikalischer, mathematischer und technischer Verfahren des Neuroimaging sowie translationaler Forschung bei Patienten mit neurologischen und psychiatrischen Erkrankungen kombiniert. Diese Strategie wird durch eine klinische Forschungsbettenstation und die intensive Vernetzung mit den umliegenden Universitätskliniken in Aachen, Bonn, Düsseldorf und Köln verstärkt. Sie trägt damit zum klinischen Translationsschwerpunkt des Forschungsbereichs bei. Im Berichtszeitraum wurde die lokale Vernetzung durch die Jülich Aachen Research Alliance (JARA) weiter intensiviert. Einer von drei Bereichen der Allianz, JARA BRAIN, integriert die beteiligten Institute im Gesundheitsbereich in Jülich (INB-2, INB-3, INB-4) mit den Kliniken für Psychiatrie und Neurologie am Universitätsklinikum in Aachen. Darüber hinaus vereinbarte das INB-3 im Rahmen einer strategischen Allianz des Forschungszentrums mit der Universität Bonn eine enge Zusammenarbeit im Forschungsschwerpunkt "Genomic Imaging". Schließlich sind die Jülicher Institute im Bereich Gesundheit Partner für das Nationale Zentrum für Neurodegenerative Erkrankungen.

# Programmergebnisse

## Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

### Programmthema 1: Signalwege und -mechanismen im Nervensystem

**Kaliumselektiver CNG-Kanal:** Zyklisch Nukleotid-gesteuerte Ionenkanäle (CNG-Kanäle) bestehen aus vier Untereinheiten, die jeweils eine Bindedomäne für den Liganden, das zyklische Nukleotid (cAMP oder cGMP) tragen. Wir untersuchten die Bindung von cAMP an bakterielle kaliumselektive CNG-Kanäle und deren isolierte Bindedomänen. Der intakte Kanal und die isolierte Bindedomäne binden cAMP nicht kooperativ mit ähnlicher Affinität. Bindung und Aktivierung dieses bakteriellen CNG-Kanals unterscheiden sich damit grundlegend von denen eukaryotischer CNG-Kanäle.

**Zwei-Fokus-FCS:** Fluoreszenz-Korrelations-Spektroskopie (FCS) wird seit langem verwendet, um Diffusionskoeffizienten Fluoreszenz-markierter Moleküle zu bestimmen. Daraus lassen sich Erkenntnisse, z.B. über die Interaktion zweier Moleküle in Lösung, gewinnen. Die Messgenauigkeit wird aber durch optische Aberrationen und photophysikalische Effekte stark beeinträchtigt. Es wurde eine neue hochpräzise Messmethode entwickelt. Der Einsatz zweier lateral versetzter, überlappender Laserfoki erlaubt es, Diffusionskoeffizienten mit höchster, bisher nie da gewesener Genauigkeit zu messen.

**Glutamatreiche Proteine in Sehstäbchen:** Stäbchen enthalten drei Arten glutamatreicher Proteine (GARP), die mit dem zyklisch Nukleotid-gesteuerten Kanal assoziiert sind. Sie wären strategisch positioniert, um den Fluss von Calciumionen von der CNG-Kanalpore ins Außensegment zu kontrollieren. Wir untersuchten die Bindung von Calcium an native und synthetische glutamatreiche Peptide. Calcium bindet mit niedriger Affinität an GARPs. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass GARPs ungeordnete Strukturen ausbilden, die Calcium zwar mit niedriger Affinität, aber hoher Kapazität binden.

**Calciumabhängige Konformationsänderung im Calciumsensor Recoverin:** Recoverin gehört zur großen Familie calciumbindender Proteine und reguliert in Stäbchen die Aktivität von Rhodopsin. Recoverin wurde an einem Cysteinrest kovalent mit dem Fluoreszenzfarbstoff Alexa647 markiert. Der Farbstoff verändert seine Fluoreszenzeigenschaften nach Aktivierung des Recoverins. Die Methode erlaubt es, calciuminduzierte Konformationsänderungen im Recoverin fluoreszenzspektroskopisch zu vermessen.

**Expression von Membranproteinen aus Halobakterien in Escherichia coli:** Erstmals ist es gelungen, das Transducer Protein HtrII aus *Natromonas pharaonis* in voller Länge heterolog in *E. coli* zu exprimieren. Dieses Membranprotein mit einem langen stabförmigen zytoplasmatischen Teil stellt einen wichtigen Bestandteil in der Signalübertragungskette dar und kann nun für weitere funktionelle Untersuchungen eingesetzt werden.

**Interaktion von Sensorischen Rhodopsin I mit dem zugehörigen Transducer HtrI untersucht mit FT-IR:** Der Phototaxis-Rezeptor SRI aus *Halobacterium salinarum* interagiert innerhalb der Membran mit seinem Transducer HtrI unter Bildung eines Komplexes. Nach Lichtanregung des rezeptoreigenen Chromophors all-trans Retinal werden strukturelle Änderungen des Rezeptors an den benachbarten Transducer weitergeleitet. Mittels kinetischer Messungen und FTIR-Untersuchungen an Fusionsproteinen mit Deletions- und Punktmutationen wurden für die Signalübertragung wichtige Bereiche bzw. Aminosäuren ermittelt.

**Die Arrestin-Rhodopsin Bindung:** Untersuchungen zur Sehkaskade auf molekularer Ebene: Arrestin ist für die Unterbrechung des Signalwegs am lichtaktivierten, phosphorylierten Rhodopsin zuständig. Der Komplex Arrestin-Rhodopsin verhindert die weitere Aktivierung des G-Proteins Transducin. Wir konnten zeigen, welche Interaktionsbereiche im Protein-Protein Komplex vorliegen, indem Arrestin mittels Punktmutationen modifiziert und mit einem Farbstoff dotiert wurde. Das Resultat der dynamischen, zeitaufgelösten Lichtstreuung ist ein "Ein"-Arrestin-"Zwei"-Rhodopsin Modell.

**Reversible und irreversible Entfaltung von Multidomänenproteinen:** Ein klassisches Problem bei der Proteinfaltung größerer Multidomänenproteine ist die Aggregation des entfalteten Zustandes. Sie verhindert häufig die erfolgreiche Faltung oder Rückfaltung dieser Proteine was zur Folge hat, dass Studien zur Proteinfaltung in diesen Fällen nicht oder nur sehr eingeschränkt möglich sind. Andererseits bilden Multidomänenproteine eine wichtige Gruppe von Zellproteinen. Am Beispiel zweier Amylasen und einer Kinase wurden Bedingungen untersucht, unter denen auch für diese Multidomänenproteine reversible

Enfaltungsübergänge möglich sind. Meist, aber nicht in allen Fällen, war bei diesen Bedingungen die Aggregation des entfalteten Zustands stark unterdrückt.

**Spektroskopische Untersuchungen an Blaulicht-Rezeptoren:** Aus dem Organismus *Chlamydomonas reinhardtii* wurde ein Cryptochrom identifiziert und in großen Mengen gereinigt. Das 59 kDa Protein bindet FAD ausschließlich in oxidierter Form. Belichtung mit blauem Licht überführt das FAD in ein neutrales Radikal, das bei einer Wellenlänge von 540 nm und von 580 nm jeweils ein Maximum aufweist. Details der Photoreaktion wurden an diesem System eingehend untersucht. Außerdem wurden für ein Cryptochrom aus *Drosophila* Expression und Reinigungsbedingungen etabliert, welche eine Ausbeute des Proteins im Milligrammbereich erlaubten, sowie Details der Photoreaktionskaskade aufgeklärt.

**Kristallstruktur des L1 Intermediates der licht-getriebenen Chloridpumpe Halorhodopsin:** In einer kombinierten röntgenkristallografischen und Infrarot-spektroskopischen Studie wurde eine zweite Chloridbindestelle im Protein nachgewiesen und darüber hinaus gezeigt, dass der licht-induzierte Transport des Chloridions in Reaktionsschritten nach dem L1 Intermediate auftreten muss.

**Wechselwirkung von HIV-1 Nef mit zellulären Proteinen und seine Rolle bei der HIV Demenz:** Es wurde die NMR-Lösungsstruktur der Hck-SH2-Domäne im Komplex mit einem artifiziellen, hochaffinen Liganden bestimmt, der in der Lage ist, Nef von der Hck-SH2 zu verdrängen. Die Verdrängung von Nef wurde biochemisch charakterisiert.

**Strukturelle Untersuchung der transmembran- und zytoplasmatischen Domänen des humanen "cluster determinant 4" Protein (CD4):** Ein CD4-Fragment wurde exprimiert, gereinigt und nach der Rekonstitution in einer künstlichen Membran strukturell untersucht. Die strukturellen Konsequenzen der Phosphorylierung zweier Serine in der zytoplasmatischen Domäne des HIV-1 Protein U (VpU) wurde zudem mittels NMR untersucht.

**Entwicklung eines Tests für den Nachweis pathologischer Proteinaggregate in Körperflüssigkeiten:** Um die Diagnose, Prognose und das Therapiemonitoring von Proteinfehlfaltungserkrankungen, z.B. AD, in Körperflüssigkeiten wie Blut und Liquor zu ermöglichen, wurde ein auf der Fluoreszenzkorrelationspektroskopie (FCS) basierender Einzelaggregatnachweis entwickelt.

**Entwicklung eines Expressions- und Reinigungssystems für rekombinantes Alzheimer Amyloid- $\beta$  (A $\beta$ )-Peptid:** Für NMR-Untersuchungen muss das A $\beta$ -Peptid isotopenmarkiert hergestellt werden. Bei uns wurde das passende System entwickelt. Weiterhin wurde die Inhibierung der A $\beta$ -Zytotoxizität und -Fibrillenbildung durch das Peptid D1, das spezifisch an A $\beta$  bindet, mit biophysikalischen Methoden nachgewiesen

**Interaktionen des Prion-Proteins und dessen Amyloid-Fibrillenbildung:** Die Struktur des Fibrillen-Vorläuferstatus des Prion Proteins wurde untersucht und es wurde eine Kinetik der keiminduzierten Fibrillenbildung erstellt. Die molekulare Struktur von alpha-helikalen Prion Protein-Dimeren wurden durch das Einfügen kovalenter Verbindungen analysiert. Die Interaktionen des zellulären Prion-Proteins mit Lipidmembranen wurden mit biophysikalischen Methoden untersucht. Weiterhin stellte sich heraus, dass die Aggregation des Prion Proteins durch die Präsenz von Glykogen gefördert wird. Zusätzlich wurde der Einfluss der Erweiterung der sogenannten "Octarepeat"-Domäne auf die native Faltung untersucht.

Die therapeutischen Effekte zweier **Liposom-basierter Impfstoffe gegen A $\beta$ -Peptid-Antigene** wurden in transgenen Alzheimer-Mäusen untersucht.

Die direkte Interaktion des **SARS Coronavirus-Protein 7a** mit dem humanen lymphocyte function associated antigen (LFA-1) konnte nachgewiesen werden.

**Identifikation verschiedener Bindepartner für das GABAA-Rezeptor-assoziierte Protein (GABARAP) durch Phagendisplay:** Die Proteine Clathrin (schwere Kette) und Calreticulin konnten als Bindepartner für GABARAP identifiziert werden.

**Strukturelle und funktionelle Aspekte synaptischer Transmission und deren Modulation im Neokortex von Säugern:** Es wurde die postnatale Entwicklung der neuronalen Netzwerke zwischen exzitatorischen Neuronen in der Lamina 4 des Neokortex mittels simultaner Patch-clamp Ableitungen, sowie Licht- und Elektronenmikroskopie untersucht. Bei Untersuchungen zur Konnektivität in einer neuronalen

Kolumne wurden Struktur-Funktionsanalysen zu neokortikalen Interneuronen durchgeführt. Unter Verwendung eigener struktureller und funktioneller Daten entstand ein erstes Modell der Signaltransduktion in einer kortikalen Kolumne. Auch wurden die Arbeiten zur Erstellung von 3D Modellen zentraler Synapsen weitergeführt, um zu realistischen Geometrien synaptischer Strukturen zu gelangen, die Grundlagen für Monte-Carlo-Simulationen verschiedener synaptischer Parameter sind.

## **Programmthema 2: Methoden zur Bildgebung im lebenden Gehirn**

**Radionuklidentwicklung:** Im Hinblick auf den Einsatz des längerlebigen Positronenstrahlers  $^{72}\text{As}$  zum Studium langsamer metabolischer Prozesse mit PET wurde eine neue Kernreaktion, welche die effektive Produktion des Radionuklids mit angereichertem  $^{72}\text{Ge}$  ermöglicht, untersucht.

**Zerfallshäufigkeiten von Non-Standard PET-Nukliden:** Zur Quantifizierung von PET Messungen wurden die Emissionswahrscheinlichkeiten der Radionuklide  $^{64}\text{Cu}$ ,  $^{76}\text{Br}$  und  $^{124}\text{I}$  für Positronen unter der Verwendung der rein produzierten Radionuklide neu bestimmt. Die Erzeugung von reinem  $^{86}\text{Y}$  und  $^{124}\text{I}$  ermöglichte Phantomstudien dieser Non-Standard PET Nuklide.

**Markierungsmethoden:** Die Untersuchung von Arylthienyliodonium Salzen als Vorläufer der regioselektiven n.c.a.  $^{18}\text{F}$ -Markierung elektronenreicher Aromaten konnte erfolgreich beendet werden.

**Entwicklung neuer Synthesemethoden:** Im Rahmen der Verbesserung der Qualität und Zuverlässigkeit der Routinesynthese von 6- $^{18}\text{F}$ Fluor-L-DOPA konnte ein neues Verfahren für dessen nukleophile und enantionmerenreine Synthese entwickelt werden, welches ein großes Potential für eine vereinfachte Automatisierung besitzt.

Im Hinblick auf eine den GMP-Richtlinien entsprechende Abstimmung zur  $^{18}\text{F}$ -Markierung aliphatischer Aminosäuren wurde das Schutzgruppenkonzept der FET-Synthese erfolgreich auf die Synthese von cis  $^{18}\text{F}$ Fluor-D-prolin für die zerebrale Diagnostik übertragen.

**Entwicklung und Erprobung von Fluoraminosäuren als Radiotracer für zerebrale Tumore:** In einer prospektiven Studie bei 33 Patienten konnte die prognostische Bedeutung der kombinierten FET-PET/MRT Diagnostik bei Patienten mit niedriggradigen Gliomen nachgewiesen werden. In einer tierexperimentellen Studie wurde gezeigt, dass FET im Gegensatz zu anderen radioaktiv markierten Aminosäuren nicht von Makrophagen im Bereich zerebraler Abszesse angereichert wird, jedoch geringe unspezifische zerebrale Anreicherungen bei einer starken Gliareaktion auftreten können.

**Entwicklung spezifischer Radioliganden:** Der serotonerge HT $_{2A}$ -Rezeptorligand  $^{18}\text{F}$ R91150 konnte erfolgreich synthetisiert und primär pharmakologisch bewertet werden.

**Aufklärung des Hauptmetaboliten von CFPX:** Die durch LC-MS Untersuchungen postulierte Struktur des Hauptmetaboliten des Adenosin A $_1$  PET-Rezeptorliganden  $^{18}\text{F}$ CFPX im menschlichem Blut, ein am Cyclopentylring difunktionalisiertes Derivat, konnte durch eine 19- stufige Aufbausynthese der Verbindung eindeutig bewiesen werden.

### **Entwicklung und Implementierung einer Vorrichtung zur Durchführung von rTMS bei PET-Studien:**

Die Kombination verschiedener funktioneller und bildgebender Methoden gewinnt eine immer größere Bedeutung. Für die gleichzeitige Durchführung von rTMS und PET-Studien konnten die technischen und apparativen Voraussetzungen geschaffen werden. In einer Pilotstudie ergaben sich Hinweise auf eine Modulation der Bindung des adenosinergen A $_1$ -Rezeptors.

**Algebraische 3D-Rekonstruktion von PET-Volumendaten:** Das Konzept eines "virtuellen PET-Scanners", durch das die universelle Einsetzbarkeit des Rekonstruktionsprogramms für unterschiedliche Systeme gewährleistet wird, wurde weiterentwickelt. Erste Anwendungen wurden für das Kleintier-PET ClearPET neuro und den Human-Scanner Siemens HR+ realisiert und erreichten eine bessere Bildqualität als die standardmäßig eingesetzten Rekonstruktionsverfahren.

**Schwächungskorrektur von PET in MR-PET-Hybrid-Scannern:** Da in zukünftigen MR-PET-Scannern des INB-3 die klassische zur Schwächungskorrektur von PET-Daten eingesetzte Transmissionsmessung nicht mehr möglich sein wird, werden alternative Methoden entwickelt. Während eine Methode die unterschiedlichen Schwächungseigenschaften der einzelnen Gewebetypen aus segmentierten MRT-Bildern

ableitet, verwendet eine zweite ein Schwächungs-Template, das an die individuelle Hirnanatomie angepasst wird.

**Rekonstruktion von 3D-Hirnmodellen aus autoradiographischen und histologischen Bildern:** Auf der Basis von Hirnschnitten werden durch geeignete Registrierungsverfahren 3D Hirnmodelle erzeugt, die die volumetrische Visualisierung von bestimmten Strukturen und pathologischen Veränderungen erlauben.

**Entwicklung von MRT-Methoden zur Bildgebung in Hochfeld MR-Systemen:** Zwei neue Sequenzen zur fMRI und DTI in Hochfeld-Systemen ("Multishot-EPI" und "STEAM-DTI") mit verbesserter Artefakt-Unterdrückung wurde entwickelt und auf der Siemens Plattform implementiert. Ortsselektive Anregung ("Selective Excitation"), eine Grundvoraussetzung für B1 Shimming und Microlmaging in vivo, wurde ebenfalls implementiert und mittels Simulationen und Messungen verifiziert.

**In vivo Natrium Bildgebung mit MRT:** Die vorhandenen Sequenzen zur Natriumbildgebung konnten auf die Siemens Plattform übertragen werden und stehen für translatorische Untersuchungen zur Verfügung. Eine Verbesserung der k-Raum Abtastung in der "SPRITE" Sequenz ermöglicht eine verbesserte räumliche Auflösung bei fast unveränderten Messzeiten.

**Aufbau eines Hochfeld-MRT Tierscanners mit klinischer Benutzeroberfläche:** Ein 9.4T Tierscanner mit klinischer Benutzeroberfläche wurde realisiert und konnte 2007 - zunächst bei 7T - in Betrieb genommen werden. Der Scanner arbeitet mit annähernd gleicher Hardware und Software wie Humansysteme und ermöglicht direkte translatorische Untersuchungen. Die zur Messung an kleinen Nagetieren (Mäuse und Ratten) erforderlichen MR-Spulen wurde entwickelt und realisiert.

**Diffusion Tensor Imaging:** Qualitative Messungen zeigten Ungenauigkeiten in der Reproduzierbarkeit von DTI Messungen. Phantome zur Messung und späteren Korrektur der Messfehler wurden realisiert. Eine neue Methode zur Erfassung kreuzender Fasern, die mit herkömmlichen DTI Auswertungen nicht möglich ist, wird entwickelt.

**Quantitative Bildgebung:** Die am Institut entwickelten quantitativen Methoden zur Bestimmung der Relaxationszeiten T1, T2 und T2\* wurden bei allen zur Verfügung stehenden Feldstärken (1.5T, 3T und 4T) evaluiert. Dank annähernd identischer Messumgebung auf den drei Systemen konnte die Feldabhängigkeit der Relaxationszeiten mit hoher Präzision in vivo ermittelt werden. Zusätzlich wurde eine Altersabhängigkeit der T1-Werte in der grauen Substanz festgestellt und mit Änderungen des Wassergehalts korreliert.

**Hochauflösende Bildgebung:** Bei der Feldstärke von 3T konnten kortikale Schichten (Gennari's Streifen) in vivo bei einer Messzeit von 1 Stunde erfasst werden (Auflösung: 0.4mm in plane, Schichtdicke: 0.5mm). Das gute Signal-zu-Rausch Verhältnis dieser Bilder konnte durch die offline Kombination koregistrierter Aufnahmen erzielt werden.

**Bildverarbeitung:** Der Prototyp zur semiautomatischen Segmentierung von Volumes-of-Interest in der grauen Substanz auf Basis eines 3D-Live-Wire-Ansatzes zur Bestimmung der Grenzkonturen auf der Hirnoberfläche wurde erfolgreich erweitert. Der Prototyp zur ASM-basierten Segmentierung wurde hinsichtlich Rechenzeit und Qualität optimiert. Zudem wurde ein Prototyp zur Topologiekorrektur basierend auf einem Multiskalenansatz fertiggestellt.

**Analyse und Regelung komplexer Systeme:** Für die Vernetzung autarker Sensoren zur Beschleunigungsregistrierung (z. B. Körperschall) ist das im ZEL entwickelte Funkprotokoll (IEEE 802.14.4 basierend) dahingehend erweitert worden, dass Sensoren nachträglich in eine schon laufende Messung zeitsynchron eingebunden werden können.

**Neue DBS-Zielgebiete für neue Indikationen:** Erstmals wurde eine tiefe Hirnstimulation bei einer Patientin mit einer erblichen Kleinhirnerkrankung durchgeführt; sie zeigte einen erheblich positivem Effekt.

**Mathematische Untersuchungen von plastizitätsinduzierten Übergängen in neuronalen Netzwerken:** Eine mathematisch-biophysikalische Untersuchung der Auswirkung unterschiedlicher Stimulationsverfahren auf das Verlernen pathologischer Konnektivität zur Erzielung lang anhaltender therapeutischer Effekte wurde realisiert.

**Entwicklung einer Stimulationstechnik zur Stabilisierung von central pattern generators (CPGs):** Wir haben mathematisch-physikalische Stimulationsverfahren zur Induktion und Stabilisierung von CPG-Aktivität in Oszillatorennetzwerken und neuronalen Netzwerken mit minimalem Stromverbrauch mit dem Ziel der Behandlung von Patienten mit inkompletter spinaler Querschnittslähmung sowie von Patienten mit Gangstörungen (gait ignition disorders), z.B. bei M. Parkinson, entwickelt.

**Entwicklung einer Stimulationstechnik zur Desynchronisation mittels instantanem Feedback:** Es wurde ein mathematisch-physikalische Stimulationsverfahrens zur robusten und effizienten Desynchronisation von pathologisch synchronisierten Oszillatorennetzwerken und neuronalen Netzwerken mittels PID (proportional-integro-differential)-Feedback entwickelt. Hierbei erfolgen Stimulation und Messung in separaten Anteilen der betroffenen Hirnregion, um Stimulationsartefakte bei der Messung zu vermeiden. Dennoch wird die gesamte Hirnregion effizient desynchronisiert.

**Tierexperimenteller Nachweis der desynchronisierenden Wirkung der coordinated reset-Stimulation:** Am Löffelstör wurde in Zusammenarbeit mit A. Neimann und D. Russell die desynchronisierende Wirkung der coordinated reset-Stimulation an burstenden Elektrorezeptoren nachgewiesen.

**Analyse von MEG-Daten in Kombination mit zytoarchitektonischen Wahrscheinlichkeitskarten:** Weiterentwicklung und Anwendung unseres Ansatzes, MEG-Analyse mit zytoarchitektonischen Wahrscheinlichkeitskarten zu kombinieren u.a. bei visuellen Experimenten.

**Langzeiteffekte nach desynchronisierender tiefer Hirnstimulation:** Mit dem in Kollaboration mit der Firma ANM Adaptive Neuromodulation GmbH entwickelten adaptiven Neurostimulator ("Hirnschrittmacher") konnte in einer Pilotstudie an 17 Patienten mit Parkinson oder essentiellen Tremor die Effektivität und lang anhaltende Wirkung der desynchronisierenden Stimulation nachgewiesen werden. Die Resultate zeigen, dass diese Tiefenhirnstimulation mittels koordiniertem Reset bei minimalem Stromverbrauch zu einer lang anhaltenden Unterdrückung der krankhaften Symptome führt.

### **Programmthema 3: Mechanismen neuronaler und psychiatrischer Erkrankungen.**

**Rezeptorarchitektonische Untersuchung des Gehirns:** Es wurde eine neue Methode zur quantitativen Auswertung von Rezeptorverteilungsmustern in der Großhirnrinde entwickelt und zur Untersuchung der Verteilung klassischer Neurotransmitter im menschlichen visuellen System verwendet. Hierbei zeigte sich ein grundlegender Unterschied im neurochemischen Aufbau zwischen den Repräsentationen des unteren bzw. oberen Gesichtsfeldes. Somit wurde neben den neurochemischen Unterschieden von Hirnarealen entsprechend ihrer hierarchischen Stellung in der Verarbeitungskette visueller Information ein zweites grundlegendes Organisationsprinzip darstellt.

**Somatosensorisches System:** Mittels der Kombination architektonischer Karten und funktioneller Magnetresonanztomographie wurde zum ersten Mal gezeigt, dass anatomische Unterareale des sekundären somatosensorischen Systems jeweils eine separate Repräsentation der Körperoberfläche beinhalten und somit eine deutliche Homologie zu nicht menschlichen Primaten zeigen.

**Lateralisierung taktiler Funktionen:** Es wurde gezeigt, dass das Ausmaß funktioneller Lateralisierung, d.h., die Wahrscheinlichkeit ipsilateraler Aktivierungen nach unilateraler Stimulation sich sowohl zwischen anatomischen Arealen als auch zwischen verschiedenen Körperteilen unterscheidet. Weiterhin wurde die spezielle Rolle der Handrepräsentation im somatosensorischen Assoziationskortex nachgewiesen.

In **Fortführung der Arbeiten zur Hemisphärenspezialisierung** konnte mit Hilfe des Dynamic Causal Modelling (DCM) gezeigt werden, dass Schlaganfall-bedingte Lähmungen durch eine interhemisphärische Rivalität bedingt sind. Dadurch ergeben sich neue Perspektiven im Bereich der motorischen Rehabilitation nach Schlaganfall. Eine fMRT-Studie zeigte die differentiellen neuronalen Kompensationsmechanismen von Patienten mit MCI (mild cognitive impairment) beim Abrufen wichtiger autobiographischer Erinnerungen. Die neuronalen Grundlagen des gerade im Alter beeinträchtigten Quellengedächtnisses bei gesunden älteren Probanden wurden ebenfalls mit fMRT bestimmt. Hierbei war von besonderem Interesse wie das Abrufen aus dem Quellengedächtnis von der individuellen Stressreaktion und der jeweiligen genetischen Disposition beeinflusst wurde.

**Brain Mapping:** Mit einem neu entwickelten Verfahren wurde es möglich, die mikrostrukturellen Korrelate von Hirnläsionen bei Patienten nach Schlaganfall zu bestimmen. In einer ersten Untersuchung bei drei Patienten nach Hirnläsion im Scheitellappen und unilateraler Agnosie der rechten Hand wurden

Unterschiede im Grad der neurologischen Beeinträchtigung festgestellt, die auf die Involvierung verschiedener mikrostrukturelle Areale zurückgeführt werden können. Darüber hinaus haben die Daten grundlagentheoretische Bedeutung für das Verständnis von sequenzieller Informationsverarbeitung von Tastinformation.

Im Rahmen des "Brain Mapping Projektes" wurden probabilistische 3D-Karten neuer Hirnregionen erarbeitet, z.B. für das bewegungssensitive Areal V5/MT und die extrastriären Areale hOc3v und hOc4v. Die Karten wurden erfolgreich eingesetzt, um Struktur-Funktionsbeziehungen über den Vergleich dieser an post mortem Gehirnen gewonnenen Karten mit Befunden funktionell-bildgebender und MEG-Untersuchungen bei Probanden während der Verarbeitung von visueller Information zu analysieren. Um solche Untersuchungen weiter zu fördern, wurde die "Anatomie-Toolbox" erweitert. Die Toolbox mit den zytoarchitektonischen Wahrscheinlichkeitskarten ist mit ca. 10.000 "downloads" seit 2005 ein weltweit akzeptiertes und hervorragend genutztes Verfahren geworden.

**Messung zerebraler Rezeptordichten mittels PET:** Eine dosimetrische Studie zum A1 Adenosinrezeptor (A1AR)-Liganden [18F]CPFPX wurde abgeschlossen. Für eine Studie zu Frühveränderungen des A1AR bei demenziellen Syndromen wurden erste Patienten rekrutiert und gemessen. Es wurde eine Zwischenauswertung der Studie zum 5-HT<sub>2A</sub>-Rezeptor bei Schizophrenie vorgenommen, welche eine stadienabhängige Reduktion des 5-HT<sub>2A</sub> in orbitofrontalen, zingulären und striatalen Regionen des Gehirns zeigte. Die Untersuchungen im Rahmen des virtuellen Instituts "Dopamine, Plasticity and Cognitive Function" zeigten eine belohnungsabhängige Freisetzung von Dopamin in Mittel- und Zwischenhirnregionen.

**GMP-Aktivitäten:** Im Rahmen des Qualitätsmanagementsystem wurden der Radiotracer [11C]ABP688 neu etabliert und in die Routineproduktion für die Humananwendung überführt.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

#### Nachwuchsförderung im Bereich neurowissenschaftlicher Gesundheitsforschung:

Der International Helmholtz Research School (IHRS) gehören inzwischen 12 Stipendiaten und 32 Kollegiaten an. Es beteiligen sich mehr als 50 Doktoranden regelmäßig an den Veranstaltungen. Auch in der International Research Training Group (IRTG, Thema: Schizophrenie und Autismus; Kooperation Universitätsklinikum Aachen, FZJ und Univ. of Pennsylvania) werden derzeit drei Stipendiaten und ein Kollegiat gefördert.

#### Vernetzung

**Nationale Vernetzung:** Im Rahmen der Exzellenzinitiative des Bundes war die RWTH Aachen mit ihrem Programm "Meeting global changes" erfolgreich. Eine von 4 Maßnahmen ist die "Jülich-Aachen Research Allianz" (JARA), eine strategische Partnerschaft zwischen der RWTH Aachen und dem Forschungszentrum Jülich. Neben JARA FIT (Informationstechnologie) und JARA SIM (Simulationswissenschaften) ist JARA BRAIN mit dem Schwerpunkt Neurowissenschaften eine der drei Säulen der Allianz. Katrin Amunts (INB-3) wurde als Jülich/Aachener Vertreterin in das zehnköpfige Strategieforum des Rektors der RWTH Aachen berufen. Die Vernetzung des Klinikums der RWTH Aachen mit dem FZJ wurde zudem durch die Übernahme der kommissarischen Leitung des Lehrstuhls Neurologie - Kognitive Neurologie am Klinikum durch Peter Weiss-Blankenhorn weiter verstärkt. Das INB-3 ist Partner für das neu zu schaffende Deutsche Zentrum für Neurodegenerative Erkrankungen, das seinen Sitz in Bonn haben wird. Im Rahmen der Helmholtz Allianz "Mental Health in an Aging Society" (Sprecher: Wolfgang Wurst, München) kooperiert das INB-3 mit drei weiteren Helmholtzzentren und sieben deutschen Universitäten. Durch die Vernetzung des Bereichs Kognitive Neurologie am INB-3 mit den Universitäten Köln und Aachen konnten Studien zu den neuronalen Grundlagen der Kognition über die gesamte Lebensspanne des Menschen hinweg realisiert werden. Diese inhaltlichen Schwerpunkte wurden auch im Rahmen weiterer Kooperationen mit verschiedenen nationalen Kliniken (Dresden, Bonn; Köln; Düsseldorf, Kiel) erfolgreich bearbeitet. Im Rahmen der Entwicklung neuer Diagnosemethoden bei Gliomen besteht zudem eine enge Vernetzung des INB-3 mit der Neurochirurgie der Universität Düsseldorf, der Strahlentherapie der RWTH Aachen und der Neurologie der Universität Köln u.a. durch die Teilnahme an einer Multicenterstudie im Deutschen Gliomnetzwerk.

**Internationale Vernetzung** wurde durch die Mitwirkung des INB-3 am International Consortium of Human Brain Mapping ICBM (Grant durch NIMH) gestärkt. Die Vernetzung mit den Neuroimaging Zentren der Universitäten UCLA in Los Angeles, MNI/McGill in Montreal und University of Texas in San Antonio wurde weiter ausgebaut. Im Rahmen eines NIH Grants wurde zudem die internationale Vernetzung auf dem Gebiet der Neurolinguistik mit der McGill Universität in Montreal sowie der Universität in San Diego intensiviert.

Darüber hinaus beteiligt sich das INB-3 an einer internationalen Graduiertenschule (IRTG) zusammen mit den Universitäten Aachen und Philadelphia.

### Neue Berufungen

Jörg Enderlein (INB-1) nahm einen Ruf auf eine W3 Professur an der Universität Tübingen an und verließ das Forschungszentrum Jülich. U. Benjamin Kaupp (INB-1) nahm einen Ruf als Wissenschaftlicher Direktor am Forschungszentrum Caesar in Bonn an, bleibt dem Forschungszentrum zunächst jedoch noch als kommissarischer Leiter des INB-1 erhalten. Arnd Baumann (INB-1) wurde "Außerplanmäßiger Professor" an der Universität Köln. Valentin Gordeliy (INB-2) nahm einen Ruf auf eine W2-Professur an die RWTH Aachen an. Er wird zukünftig eine Arbeitsgruppe am INB-2 leiten. Zudem erhielt er einen W3 äquivalenten Ruf der CEA am IBS in Grenoble, den er ablehnte. Henrike Heise erhielt einen Ruf auf eine W2-Professur an die Universität Düsseldorf und nahm diesen an. Sie wird zukünftig eine Arbeitsgruppe am INB-2 leiten. Peter A. Tass nahm einen Ruf auf eine W3-Professur für Neuromodulation an der Universität zu Köln an. Er wurde zudem zum Direktor am INB-3 benannt.

### Technology Transfer / Translational Research

**Technologietransfer:** Die im Dezember 2005 ausgegründete Firma ANM Adaptive Neuromodulation GmbH arbeitet an der Weiterentwicklung automatisierter Software für die intraoperative und postoperative Testung sowie an der Entwicklung eines implantierbaren Neuromodulators und an der Entwicklung und Fertigstellung von Prototypen für die visuelle und die auditorische Neuromodulation; diese Vorrichtungen erlauben eine nicht-invasive Stimulation zur Desynchronisation pathologischer Hirnrhythmen. Darüber hinaus wurden im Rahmen der Entwicklung innovativer Methoden für die Neurobildung sowie bei der Weiterentwicklung der Neuromodulation je drei Patente eingereicht. Die am INB-3 entwickelte FET-PET hat sich als hochleistungsfähige neue Methode zur Hirntumordiagnostik erwiesen und wird inzwischen an mehreren deutschen Kliniken eingesetzt.

**Translational Research:** Mit JARA BRAIN (siehe auch nationale Vernetzung) entsteht eine in Deutschland einzigartige Vernetzung von Grundlagenforschung, klinischer Forschung und technisch-methodischer Kompetenz. Um den Translationsaspekt zu verstärken, werden Wissenschaftler in Klinik und Forschung unterstützt, indem das im Ausland bereits etablierte Bild des "klinischen Wissenschaftlers" eingeführt wird.

### Drittmittleinwerbung

Neu bewilligt wurde die Helmholtz Allianz "Mental Health in an Aging Society" HelMA (Sprecher: Wolfgang Wurst, München) an der das INB-3 maßgeblich beteiligt ist. Darüber hinaus wurde ein NIH Grant "Sentence processing in normal and aphasic populations" in Zusammenarbeit mit den Universitäten in Montreal und San Diego eingeworben. Von der DFG wurde im Jahr 2007 das Projekt "Neural correlates of aphasic symptoms in spontaneous speech" bewilligt. Das BMBF fördert die Vorhaben "Structure and function of the frontal operculum" sowie "A multivariate profile of dyslexia for individualised teaching and training".

### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

#### Einzelmolekül-Spektroskopie

Die Entwicklung eines präzisen und robusten Verfahrens zur Messung der Diffusion von Molekülen bei pico- bis nanomolaren Konzentrationen wurde erfolgreich abgeschlossen. Mit der dual-focus Fluorescence Correlation Spectroscopy (2fFCS) wurde ein Verfahren gefunden, das die absolute Diffusionsmessung mit mehr als 4 % absoluter Genauigkeit nahe am Limit unendlicher Verdünnung zulässt. Nach Validierung des Verfahrens wurde es für die Größenbestimmung verschiedener Proteine eingesetzt. Zudem wurden mit Hilfe des Verfahrens Ionen-Bindungs-Kurven dieser Proteine über ihre Größenänderung bei Ionenbindung gemessen. In Zusammenarbeit mit dem INB-2 wurde das Verfahren auch erfolgreich für die Untersuchung membrangebundener Proteine und Proteinkomplexe verwendet.

Die Arbeiten an der Optimierung und Anwendung der Fluorescence Lifetime Correlation Spectroscopy (FLCS), bei der multivariate Fluoreszenzkorrelogramme über die Fluoreszenzlebenszeitsignatur der sich im Sample befindlichen Moleküle erfasst werden können, wurden fortgeführt. Auch die Untersuchung der elektrodynamischen Wechselwirkung von fluoreszenten Molekülen mit metallischen Nanostrukturen wurde in enger Zusammenarbeit mit mehreren internationalen Gruppen weitergeführt.

## Einrichtung einer klinischen Einheit

Die neurowissenschaftliche Bettenstation war im Jahr 2007 voll in Betrieb und wurde im Rahmen zahlreicher Projekte wie z.B. Untersuchungen bei Patienten mit M. Parkinson und neu-implantierten zerebralen Tiefensonden sowie bei neurokognitiven Studien intensiv genutzt.

## Weitere Programmentwicklung

Im **Programmthema 1** "Signalwege und Mechanismen im Nervensystem" sollen Arbeiten zu molekularen Grundlagen und zellulären Mechanismen neuronaler Vorgänge auch nach dem Weggang von Benjamin Kaupp weitergeführt werden. Dabei stehen vor allem molekularbiologische und fluoreszenzspektroskopische Arbeiten im Mittelpunkt. In der nächsten Runde der Programm-orientierten Förderung werden die Aktivitäten des INB-1 im PoF-Programm "Biosoft" angesiedelt sein. Die Strukturbiochemie soll weiter ausgebaut werden und eine Brückenfunktion zwischen den Bereichen Schlüsseltechnologie und Gesundheit einnehmen.

Im **Programmthema 2** wird der Prototyp eines Hirnschrittmachers an größeren Patientenkollektiven getestet werden. Neue Applikationen, auch ausserhalb motorischer Funktionsstörungen, werden nach ersten Erfolgen auch weiterhin in Zusammenarbeit mit der Neurochirurgie, der Neurologie und der Psychiatrie der Universitätsklinik Köln bei Patienten erprobt werden.

Die Entwicklung neuer Radioliganden für in vivo PET-Untersuchungen wird fortgesetzt. Der Aufbau eines PET-Prototypen basierend auf einer monolithischen Blockstruktur ist für das 9,4 Tesla Kleintier-MRT vorgesehen und erlaubt erste kombinierte MRT-PET Messungen. Schwerpunkt wird weiterhin ein neues Verfahren zum molekularen Imaging mit PET integriert in einen 9,4 Tesla Höchstfeld-Magnet-Tomographen in enger Kooperation mit der Industrie (Siemens) durch ein weltweit einzigartiges MRT-PET-Hybrid-System sein. Mit den dazu notwendigen baulichen Veränderungen wurde begonnen. Diese werden im Laufe des kommenden Jahres abgeschlossen, so dass die Implementierung des Hybrid-Systems erfolgen kann.

**Programmthema 3:** Neben der plangemäßen Fortsetzung der begonnenen Untersuchungen im Bereich kognitive Neurologie in Zusammenarbeit mit der Universität Köln wurde gemeinsam mit der Universität Bonn und der RWTH Aachen eine mehrjährige Längsschnittuntersuchung initiiert. Im Rahmen der Studie wird eine genomweite Analyse, neuropsychologische Testung und Neuroimaging-Verfahren zur Abbildung der Hirnalterung bei zunächst 1500 unselektierten Probanden (älter als 50 Jahre) durchgeführt. Ziel ist es, eine Frühdiagnostik und -therapie neurodegenerativer Erkrankungen vor dem Auftreten klinischer Symptome durch die Identifikation von Biomarker-Konstellationen zu ermöglichen. Die Ziele dieser Longitudinalstudie werden im Rahmen der jüngst begutachteten Helmholtz Kohorte vertieft und auf ein erheblich größeres Probandenkollektiv ausgeweitet werden. Weiterhin soll die Implementierung des Gesundheitsteilbereiches Systembiologie des Gehirns, der auf der Helmholtz-Initiative Systembiologie beruht und mit dem bereits begonnen wurde, weiter vorangetrieben werden.

---

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Biotechnologie

Keine HGF-Zuordnung.

Die Arbeiten zur "Biotechnologie" im Forschungszentrum Jülich werden zu 100% durch das Land NRW finanziert.

**Beteiligte Institute:** [IBT](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Christian Wandrey, IBT, [c.wandrey@fz-juelich.de](mailto:c.wandrey@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
- 

## Highlight

Mit verschiedenen Stämmen von *Corynebacterium glutamicum* werden auf Basis von Glukose und Ammoniak jährlich mehrere Millionen Tonnen L-Aminosäuren für die Nahrungsmittel- und Futtermittel-Industrie produziert. Größtes Produkt ist das vorwiegend als Geschmackverstärker genutzte Natriumglutamat mit 1,5 Millionen Tonnen pro Jahr. Trotz vieler Studien gab es bisher keine klaren Vorstellungen der molekularen Mechanismen, die zur Glutamat-Ausscheidung führen. Wir konnten nun zwei Proteine identifizieren, die Proteinkinase PknG und das Inhibitorprotein OdhI, die von zentraler Bedeutung für die Glutamatbildung sind. Die Proteinkinase G phosphoryliert das OdhI-Protein, wodurch dessen Aktivität, nämlich die Hemmung des Enzyms 2-Oxoglutarat-Dehydrogenase, aufgehoben wird. Ein Stamm, dem das OdhI-Protein fehlt, kann praktisch kein Glutamat mehr bilden, während ein Stamm, dem die Proteinkinase PknG fehlt, eine bis zu zweifach erhöhte Glutamat-Bildungsrate und -Ausbeute erzielt. Diese Ergebnisse sind von großem wissenschaftlichem Interesse und bilden gleichzeitig die Grundlage für ein neues Verfahren zur rationalen Verbesserung von Glutamat-Produktionsstämmen mittels "metabolic engineering".

## Ziele

Die Entwicklung biotechnologischer Verfahren zur Herstellung von (Fein)-Chemikalien, wie z.B. Vitaminen und Aminosäuren, Pharmaprodukten und Proteinen sowie die Etablierung der mikrobiellen Systembio(tech)nologie stehen im Mittelpunkt der FE-Arbeiten des Instituts für Biotechnologie. Diese Forschungs- und Entwicklungsarbeiten umfassen sowohl grundlagenorientierte als auch anwendungsbezogene Themen. Als Biokatalysatoren werden Mikroorganismen, insbesondere Bakterien, sowie isolierte Enzyme eingesetzt. Um die Syntheseleistungen dieser verschiedenen biologischen Systeme gezielt verbessern zu können, z.B. durch "metabolic engineering" und "protein design", sind umfangreiche Untersuchungen zum Stoffwechsel und dessen Regulation sowie zur Struktur und Funktion von Enzymen erforderlich. Dazu werden modernste Technologien wie Transkriptomics, Proteomics, Metabolomics oder Fluxomics eingesetzt. Ferner werden reaktionstechnische und verfahrenstechnische Arbeiten für eine möglichst optimale Nutzung der Mikroorganismen und Enzyme ausgeführt.

In Verbindung mit mikrobiologischen, biochemischen und molekularbiologischen Untersuchungen ermöglichen die im IBT neu etablierten Methoden zur globalen Analyse der Zelle auf Ebene der RNA (DNA-Microarray-Technik), der Proteine (2D-Gelelektrophorese, MALDI-TOF/TOF-Massenspektrometrie), der Metaboliten (LC-MS/MS, GC-MS) sowie der In-vivo-Stoffflüsse (basierend auf <sup>13</sup>C-markierten Zuckern) ein in der Vergangenheit unerreichbares umfassendes Verständnis der Physiologie, des Stoffwechsels und der Regulationsnetzwerke von Zellen. Diese Art von Untersuchungen bilden die Basis für eine systembiologische Analyse der bakteriellen Zelle, die dafür aufgrund verschiedener Charakteristika (keine

intrazellulären Kompartimente, genetisch leicht zu modifizieren, unter definierten Bedingungen kultivierbar, relativ kleines Genom) als Modell wesentlich besser geeignet ist als höhere Zellen. Gleichzeitig erlaubt die systembiologische Betrachtungsweise die Erkennung von Limitationen bei der mikrobiellen Herstellung von Produkten und liefert damit Ansatzpunkte zur Optimierung der Produktionsstämme.

Ferner befasst sich das IBT mit dem Biotechnikum mit den reaktions- und verfahrenstechnischen Aspekten der Biotechnologie. Für die Synthese chiraler Bausteine und Wirkstoffe werden enzymkatalysierte und bioorganische Schritte kombiniert. Ganze Mikroorganismen werden für Biotransformationen und Fermentationsprozesse eingesetzt. Durch intrazelluläre Stoffflussanalyse und Metabolitbilanzierung unter Prozessbedingungen werden Wachstum und Produktbildung optimiert. Integraler Bestandteil ist hierbei die Entwicklung von Strategien und Prozessen für die Isolierung biotechnologisch hergestellter Produkte.

Neben der Zusammenarbeit mit einer Reihe von Instituten und Infrastruktureinrichtungen des Forschungszentrums Jülich besteht eine besonders intensive Kooperation mit den Instituten für Molekulare Enzymtechnologie und Bioorganische Chemie der Universität Düsseldorf auf dem Gelände des Forschungszentrums Jülich. Die Arbeiten des Instituts für Biotechnologie werden damit auf wichtigen Gebieten ergänzt. Dadurch steht heute in Jülich an einem Ort das gesamte Methodenspektrum zur Verfügung, um im Feld mikrobielle Biotechnologie erfolgreich zu sein.

Zur Modellierung und Aufklärung von Stoffflüssen und deren Regulation in Mikroorganismen sind verschiedene Methoden der Informatik erforderlich. Es ist deshalb auch eine Kooperation auf dem Gebiet der Simulation in der Biotechnologie mit der Universität Siegen aufgenommen worden. Ferner gibt es zahlreiche Kooperationen außerhalb des Forschungszentrums mit Forschungsinstituten und industriellen Partnern. Die Forschungsergebnisse des IBT werden von einer Reihe von Industriepartnern bereits genutzt und führten in den letzten Jahren auch zu einigen Firmengründungen.

## **Ergebnisse**

### **Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse**

Mit verschiedenen Stämmen von *Corynebacterium glutamicum* werden auf Basis von Glukose und Ammoniak jährlich mehrere Millionen Tonnen L-Aminosäuren für die Nahrungsmittel- und Futtermittel-Industrie produziert. Größtes Produkt ist das vorwiegend als Geschmackverstärker genutzte Natriumglutamat mit 1,5 Millionen Tonnen pro Jahr. Trotz vieler Studien gab es bisher keine klaren Vorstellungen der molekularen Mechanismen, die zur Glutamat-Ausscheidung führen. Wir konnten nun zwei Proteine identifizieren, die Proteinkinase PknG und das Inhibitorprotein OdhI, die von zentraler Bedeutung für die Glutamatbildung sind. Die Proteinkinase G phosphoryliert unter bestimmten Bedingungen das OdhI-Protein, wodurch dessen Aktivität, nämlich die Hemmung des Enzyms 2-Oxoglutarat-Dehydrogenase, aufgehoben wird. Da die Aktivität der 2-Oxoglutarat-Dehydrogenase entscheidend dafür ist, ob 2-Oxoglutarat oxidiert oder reduktiv zu Glutamat umgesetzt wird, untersuchten wir den Einfluss des Fehlens von OdhI und PknG auf die Glutamat-Bildung. Es zeigte sich, dass die Glutamat-Ausscheidung in dem Stamm mit fehlendem OdhI-Protein nahezu vollständig aufgehoben war. Das OdhI-Protein wurde somit als ein entscheidender Faktor der Glutamat-Bildung identifiziert. Im Fall des Stamms mit fehlender Proteinkinase G konnte dagegen eine bis zu zweifache Steigerung der spezifischen Glutamat-Bildungsrate und der Glutamat-Ausbeute erzielt werden. Damit konnte ein neues Verfahren zur rationalen Verbesserung von *C. glutamicum*-Glutamatproduktionsstämmen mittels "metabolic engineering" etabliert werden.

Im Rahmen der systembiologischen Untersuchung der Regulation des Stoffwechsels von *C. glutamicum* wurden zwei neue Transkriptionsregulatoren, GntR1 und GntR2, identifiziert und charakterisiert, die sich gegenseitig ersetzen können. Sie kontrollieren parallel sowohl die Gene für Aufnahme und Verstoffwechslung der Zuckersäure Gluconat als auch für den Import von Glucose. Da Glucose und Gluconat parallel verstoffwechselt werden, kann auf diese Weise die Gesamtaufnahmerate an Kohlenstoffquelle an die metabolische Kapazität der Zelle angepasst werden. Gluconat ist ein interessantes Substrat für die Herstellung von Produkten, bei deren Synthese sehr viel NADPH benötigt wird (z. B. die Aminosäure L-Lysin), da Gluconat ausschließlich über den Pentosephosphat-Weg verstoffwechselt wird. Die bisher zur genomweiten Genexpressionsanalyse von *Corynebacterium glutamicum* verwendeten DNA-Mikroarrays basierend auf doppelsträngigen, ca. 500 bp langen PCR-Produkten, wurden abgelöst von neuen DNA-Mikroarrays, die auf einzelsträngigen 70mer-Oligonukleotiden basieren. Im Rahmen dieser Umstellung wurde die Jülich Microarray Database erweitert und entsprechend angepasst.

Ein wichtiger Schritt bei der mikrobiellen Herstellung von (Fein-)Chemikalien aus Zuckern ist ihre Sekretion aus der Zelle. Dabei spielt die Zellhülle der verwendeten Mikroorganismen eine entscheidende Rolle. Ein Ziel der Arbeiten im IBT ist daher auch die Aufklärung der Struktur, Zusammensetzung und Biosynthese der komplex aufgebauten Zellhülle von *C. glutamicum*. Dabei dient *C. glutamicum* auch als idealer Modellorganismus die Aufklärung der Zellhülle des Tuberkuloseerregers *Mycobacterium tuberculosis*, da die Glycan- und Lipoglycan-Grundstrukturen in beiden Organismen sehr ähnlich oder identisch sind. Für die Synthese dieser Grundstrukturen sind insbesondere Glycosyltransferasen (Zucker-übertragende Enzyme) verantwortlich. Im Rahmen unserer Arbeiten konnte die Funktion von zwei der Glykosyltransferasen (NCgl0452/Rv0557 und NCgl2093/Rv2174) aufgeklärt und das molekulare Verständnis der Zellhüllenbiosynthese erweitert werden. Weiterhin konnte die Untereinheitenzusammensetzung der beiden Proteinkomplexe (Acyl-CoA-Carboxylasen) aufgeklärt werden, welche die ersten Schritte in der Biosynthese der Fettsäuren und der Mycolsäuren (2-Alkyl-3-hydroxy-Fettsäuren) katalysieren. In Corynebakterien und Mycobakterien bilden die Mycolsäuren eine äußere Lipidmembran, die beim Austausch von Stoffen mit der Umgebung eine wichtige Rolle spielt.

Bei der Ganzzellbiotransformation werden nicht-wachsende, aber metabolisch aktive Zellen für die enzymatische Umsetzung einer Vorstufe in das gewünschte Produkt eingesetzt. Bei der reduktiven Biotransformation beinhaltet die Umsetzung eine Reduktion der Vorstufe, z.B. bei der Konversion von D-Fructose zu D-Mannitol, einem für verschiedene Zwecke eingesetzten Zuckeralkohol, der bisher chemisch produziert wird (40 000 Tonnen pro Jahr). Unsere Arbeiten führten zu einem *C. glutamicum*-Stamm, der Fructose mit Formiat zu Mannitol reduziert. Als limitierender Schritt konnte der Import von Fructose in die Zelle identifiziert werden. Durch genom-basierte Sequenzvergleiche konnten zwei *C. glutamicum*-Proteine mit Strukturähnlichkeit zu Zucker-"Facilitatoren" identifiziert werden. Durch Überexpression der entsprechenden Gene konnte die D-Mannitolproduktivität verdoppelt werden, was darauf hinweist, dass die kodierten Proteine tatsächlich den Fructose-Transport verbessern. Da der Transport von freier Fructose auch der fermentativen Gewinnung von Aminosäuren ausgehend von Saccharose eine wichtige Rolle spielt, ist die Identifizierung der beiden Fructose-Transporter auch in diesem Arbeitsfeld von Interesse.

Für oxidative Ganzzellbiotransformationen, bei denen die Umsetzung eine Oxidation des Substrats beinhaltet, wird oft das Essigsäurebakterium *Gluconobacter oxydans* eingesetzt. Allerdings bedarf es eines hohen Aufwands, um die dafür benötigten Zellen zu erhalten, da *G. oxydans* nur einen geringen Zellertrag hat. Um diesen zu steigern, wurden die Gene für zwei Glucose-Dehydrogenasen inaktiviert. Bei Wachstum mit Glucose führte dies zu einem vierfach erhöhten Zellertrag und gleichzeitig wurde die Bildung der Nebenprodukte Gluconat und Ketogluconat unterdrückt.

Bei der bakteriellen Produktion von heterologen Proteinen ist ihre Sekretion in den Kulturüberstand praktisch immer wünschenswert, da auf diese Weise die anschließende Aufreinigung wesentlich vereinfacht wird. Es sind zwei Wege der Proteinsekretion bekannt, die als Sec- und Tat-Weg ("twin-arginine translocation") bezeichnet werden. Im Gegensatz zum Sec-Weg erlaubt der alternative Tat-Weg den Transport von gefalteten Proteinen durch die bakterielle Cytoplasmamembran. Ein entscheidender Schritt im Transport ist die Erkennung des Signalpeptids des sekretierten Proteins. Es konnten nun Mutationen in den Proteinen TatB und TatC isoliert werden, die zu einer herabgesetzten Spezifität der Tat-Signalpeptiderkennung führen. Dies kann ggf. zur Verbesserung der Sekretion heterologer Proteine eingesetzt werden. Weiterhin zeigte eine vergleichende Analyse eines heterologen Modellproteins (GFP) in drei verschiedenen Gram-positiven Bakterien (*Bacillus subtilis*, *Staphylococcus carnosus*, *C. glutamicum*), dass nur *C. glutamicum* in der Lage war, korrekt gefaltetes und aktives GFP effizient über den Tat-Weg in den Kulturüberstand zu sekretieren. Dies war überraschend, da *C. glutamicum* im Gegensatz zu den beiden anderen untersuchten Bakterienarten außer der Cytoplasmamembran noch eine zweite hydrophobe Zellschicht aus Mykolsäure-Derivaten besitzt, welche eine weitere Permeabilitätsbarriere für Proteine darstellt. In zukünftigen Arbeiten soll *C. glutamicum* als industriell einsetzbares Expressionssystem für heterologe Proteine etabliert werden.

In Zusammenarbeit mit dem Institut für Molekulare Enzymtechnologie (IMET) wurde die Aminosäure-Racemase 5.1.1.10 in *Escherichia coli* überproduziert und aufgereinigt, die u.a. auch Asparagin racemisiert. Wird eine gesättigte racemische Asparaginlösung in Gegenwart von L-Asparagin-Saatkristallen allmählich abgekühlt, so kommt es zu einer Kristallisation von weiterem L-Asparagin. Dabei erhöht sich allerdings die Übersättigung der verbleibenden Mutterlauge bezüglich D-Asparagin. Durch Zusatz der Racemase in der Mutterlauge kann die Übersättigung des unerwünschten Enantiomeren reduziert und die Kristallisation des erwünschten Enantiomeren erhöht werden. Damit ist theoretisch eine Ausbeute von 100% des erwünschten Enantiomeren möglich. An der Etablierung eines entsprechenden Prozesses wird gearbeitet.

Die Arbeiten zur elektroenzymatischen Deracemisierung von Aminosäuren abgeschlossen. Es konnte gezeigt werden, dass durch die Kombination aus unselektiver elektrochemischer Reduktion und enantioselektiver Oxidation optisch aktive Aminosäuren in ihrer Konfiguration umgekehrt werden können. Ebenso können mit dieser Methode chirale Aminosäuren aus den Ketosäuren oder aus dem racemischen Gemisch hergestellt werden. Die Produktivität ist dabei um bis zu einem Faktor 10 größer als bei dem elektroenzymatischen Konkurrenzverfahren unter Verwendung von Aminosäuredehydrogenasen.

Das potentielle Protein-Krebstherapeutikum MUC1 wird fermentativ als Fusionsprotein MUC1-IgG-Fc in CHO-Zellen ("chinese hamster ovary cells") gewonnen. Der IgG-Anteil erleichtert zwar die Proteinsekretion bei der Produktion, muss aber zur Gewinnung des eigentlichen Therapeutikums MUC1 durch eine Rinder-Enterokinase abgespalten werden. Dieses Enzym konnte gegenüber dem Stand der Literatur durch Verbesserung des Fermentations- und Aufarbeitungsverfahrens in bis zu zehnfach höherer Aktivität gewonnen werden (2,9 U/g Biomasse). An einer weiteren Verbesserung des biologischen Systems und des Aufarbeitungsprotokolls (über His-Tags) wird gearbeitet.

Die Entwicklung von Probenahmetechniken zur Messung von intrazellulären Metaboliten aus Säugerzellkulturen wurde in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe und der Universität Bielefeld fortgesetzt. Dabei kommt ein Mikrowärmetauscher zum Einsatz, der das schnelle und schonende Abkühlen von Zellsuspensionen einer CHO- und einer SP2.0-Zelllinie ermöglicht. Das Verfahren führt nicht zur Schädigung der Zellstruktur. Die neue Probenahmetechnik wurde zur Untersuchung von Suspensionszellkulturen eingesetzt, wobei die intrazellulären Metaboliten erfolgreich mittels der etablierten LC-MS/MS-Technik quantifiziert werden konnten. Aufgrund der erhaltenen stark unterschiedlichen Metabolitkonzentrationen in den CHO-Zellen bzw. SP2.0 -Zellen wurden erste Ansätze zum Verständnis des fermentativen Nebenproduktspektrums beider Zelllinien abgeleitet, die auf die Optimierung der Prozessführung abzielen. Gleichzeitig konnten in einer Untersuchung zum Wirkmechanismus eines potentiellen Krebstherapeutikums gute Hinweise auf Einzelheiten dieses Wirkmechanismus erhalten werden. In Gegenwart des Wirkstoffes wird das Verhältnis zwischen Energiestoffwechsel und Baustoffwechsel deutlich verändert. Da Tumorzellen einen erhöhten Baustoffwechsel aufweisen, können somit Varianten des Wirkstoffes gezielt auf die angestrebte metabolische Wirkung untersucht werden.

Für die systembiologische Modellierung von *C. glutamicum* wurden Softwaretools weiterentwickelt mit dem Ziel, sogenannte "Multi-Omics"-Datensätze (Genomics, Proteomics, Metabolomics) zu kombinieren. Ein sogenanntes "Multiskalenmodell" wurde am Beispiel des Zitronensäurezyklus etabliert und mit experimentellen Daten modelliert. Auf der Basis der Abweichungen von Modell und Experiment wird versucht, Hinweise auf neue Regulationsmechanismen im Netzwerk zu erhalten. Am Beispiel von *C. glutamicum* wird eine Datenbank für ein genomweites, stöchiometrisches Modell etabliert. Dieses stöchiometrische Netzwerk beinhaltet nicht nur die Verstoffwechslung von klassischer  $^{12}\text{C}$ -Glukose, sondern auch von den Isotopomeren von  $^{13}\text{C}$ -Glukose. Bei der computer-gestützten Etablierung des Transitionsnetzwerkes aller möglichen Isotopomere für die bisher bekannten stöchiometrischen Reaktionen wurden über 100.000 Isotopomere erhalten.

Für die gerichtete Prozessentwicklung in der biopharmazeutischen Industrie, primär auf dem Gebiet Proteinaufreinigung, werden Hochdurchsatz-Screening-Methoden (HTS) etabliert, in Kooperationen mit mehreren international tätigen Firmen. Der grundlegende Ansatz besteht in der Miniaturisierung und Parallelisierung von experimentellen Systemen zur prozessrelevanten Parametergewinnung. Durch die Nutzung von modernen Pipetierplattformen erfolgt zudem eine Automatisierung der Experimente. Die Entwicklung beinhaltet drei Bereiche. Im Bereich 'Experimentelle Systeme' wurde eine Methodik zum Screenen von Proteinlöslichkeiten entwickelt, die es erlaubt die Löslichkeit von Proteinen bis zu einem vielfachen der in der Prozesslösung vorliegenden Ausgangskonzentration zu messen. Diese Messungen bilden die Basis für Arbeiten zum automatisierten Screening der Rückfaltung von denaturierten und aggregierten Proteinen ("inclusion bodies"). Löslichkeitsdaten sind auch hilfreich für die gezielte Präzipitation von Proteinen sowie für chromatographische Methoden. Auf dem Feld der Chromatographie wurden vollständige Trennprozesse auf der Basis von miniaturisierten Säulen etabliert. Die erhaltenen Ergebnisse zeigten eine gute Übertragbarkeit zu Daten auf der Basis von klassischen Chromatographiemethoden. Im Bereich "Analytik" die wichtigsten Methoden (Protein A-Chromatographie, Größenausschlusschromatographie, ELISA) für die Optimierung von Aufarbeitungsprozessen in der Antikörperindustrie etabliert. Die hohe experimentelle Datendichte verlangt eine intelligente Versuchplanung, Durchführung und Auswertung. Hierzu werden genetische Algorithmen verwendet. In einem geschlossenen Kreis von Versuchplanung, Durchführung und Auswertung konnten chromatographische Verfahren und wässrige Zwei-Phasen Systeme optimiert werden. Neben einer weiteren Miniaturisierung der verschiedenen Verfahren wurden erste Schritte zur Prädiktion von chromatographischem Verhalten durchgeführt. Dieser Ansatz nutzt die energetische Beschreibung von Proteinoberflächen. Die theoretischen Voraussagen werden

mit den experimentell bestimmten Proteinorientierungen bei der Adsorption verglichen. Ziel dieses Forschungszweiges ist es, vor dem eigentlichen Screening künftig über ‚in-silico‘-Voraussagen den experimentellen Aufwand weiter zu verringern.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Das Institut für Biotechnologie hat sich immer um die Nachwuchsförderung bemüht. So sind allein in den letzten 25 Jahren an ehemalige Mitarbeiter des Institutes 21 Rufe auf Professuren ergangen. Im Berichtsjahr hat ein Mitarbeiter einen Ruf an die Universität Karlsruhe erhalten. Zwei Nachwuchswissenschaftler haben ihre Habilitationsverfahren eingeleitet, eine Nachwuchswissenschaftlerin sowie ein Nachwuchswissenschaftler beginnen zur Zeit Arbeiten, die in späteren Jahren zur Habilitation führen sollen. Im Berichtsjahr wurden 14 Promotionen erfolgreich abgeschlossen, davon eine mit "summa cum laude". Außerdem wurden 7 Universitäts-Diplomarbeiten, 8 Fachhochschul-Diplomarbeiten sowie eine Fachhochschul-Masterarbeit abgeschlossen.

Das Institut für Biotechnologie trägt zum Systemlösungskomplex Lebenswissenschaften bei. Es werden Brücken zur Biophysik und zur Physik der Zelle geschlagen. Dabei geht es um die gemeinsame Aufklärung der Interaktion zwischen Biomolekülen und um die Analyse von Proteinstrukturen. Systembiologische Ansätze mit den Methoden Genomics, Transcriptomics, Proteomics, Metabolomics und Metabolic Engineering werden auch gemeinsam mit der Hirnforschung, der Umweltforschung und der Zentralen Analytik verfolgt. Insbesondere konnte die cytosolische Metabolitenanalytik über LC-MS- und GC-MS-Techniken gemeinsam bis in den nanomolaren Bereich fortentwickelt werden. Die mikrobielle Biotechnologie hat auch Schnittmengen mit der "roten" Biotechnologie" in der Gesundheitsforschung und mit der "grünen" Biotechnologie" in der Umweltforschung. Durch eine zunehmend quantitativer werdende Biologie und durch die Fülle von Daten, die über die modernen "Polyomics"-Methoden zur Verfügung stehen, wird es in zunehmendem Maße möglich, komplexe Stoffwechsel- und Regulationsnetzwerke, z.B. von ganzen Mikroorganismen, quantitativ zu erfassen. Dadurch ergeben sich hervorragende Synergien zwischen den experimentell arbeitenden Instituten und dem Bereich Simulation und Supercomputing im FZJ.

Bei der biotechnologischen Forschung gibt es die Besonderheit, dass zwei Institute der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, das Institut für Molekulare Enzymtechnologie (IMET) und das Institut für Bioorganische Chemie (IBOC), auf dem Gelände des FZJ angesiedelt sind, um dort die hervorragende technisch-wissenschaftliche Infrastruktur des Zentrums und insbesondere des Biotechnikums des FZJ mit nutzen zu können. Darüber hinaus existieren zahlreiche Forschungs- und Lehrprojekte mit anderen Hochschulen in NRW. Eine Besonderheit ist auch das gemeinsame Wirken der RWTH Aachen und des FZ Jülich im "Life-Tec Aachen-Jülich e.V."

Folgende Einzelprojekte werden in Zusammenarbeit mit Hochschulen in NRW durchgeführt:

- Kooperation mit der Universität Köln auf dem Gebiet der mikrobiellen Aminosäure-Sekretion und der Fluoreszenzmikroskopie (Prof. R. Krämer),
- Zusammenarbeit mit der Universität Bochum auf dem Gebiet der mikrobiellen Proteomforschung (Prof. M. Rögnér),
- Kooperation mit der Universität Bielefeld auf dem Gebiet der mikrobiellen Genomforschung (Prof. A. Pühler),
- Beteiligung am Centrum Molekulare Biotechnologie (Masterstudiengang Molekulare Biotechnologie) an der Universität Bonn (Sprecher: Frau Prof. E.A. Galinski),
- Beteiligung am Studiengang Biochemie an der Universität Düsseldorf (Sprecher: Prof. H. Weiss),
- Beteiligung am Graduiertenkolleg "Biokatalyse in unkonventionellen Medien" an der RWTH Aachen (Sprecher: Prof. W. Leitner),
- Zusammenarbeit mit der Universität Siegen auf dem Gebiet der Systembiologie (Prof. W. Wiechert).

Das Institut für Biotechnologie hat im Berichtsjahr insgesamt 1,75 Millionen EUR Drittmittel eingenommen. Das Institut ist weiterhin im Drittmittelbereich bei nationalen und internationalen Programmen beteiligt.

### **BMBF**

- "GenoMik-Plus: Funktionelle Genomforschung an Bakterien"
- "GenoMik-Plus: Physiologie des Wachstums von *Gluconobacter oxydans* ..."
- "Designer Mikroorganismen - Die Zelle als nachhaltige Fabrik"

- "Entwicklung einer neuen Plattformtechnologie für Chromatographieverfahren"
- "Systemorientierte Analyse des Zentralstoffwechsels von Aminosäureproduzenten"
- "Der tumorspezifische Stoffwechsel als Target ..."
- "Verbundprojekt Genomic Design"

## **BMVEL**

- "Fermentative Herstellung von Feinchemikalien auf Zuckerbasis"

## **DFG**

- Graduiertenkolleg: "Biokatalyse in nicht konventionellen Medien" (zusammen mit der RWTH Aachen und der Universität Düsseldorf)

## **DBU (Deutsche Bundesstiftung Umwelt)**

- "Verzweigt-kettige Aminosäureproduktion mit *C. glutamicum*"
- "Innovatives nachhaltiges Verfahren zur Biotransformation von in Wasser un- oder schwer löslichen Verbindungen ..."

## **EU**

- "Functional genomic characterisation of the bacterial Tat complex ..."

## **INDUSTRIE**

- Amino
- Bayer Healthcare
- DSM Nutritional Products
- Evonik-Degussa
- Genentech
- Novo Nordisk

## **Weitere Vorhabensentwicklung**

Auf Seite der Grundlagenforschung sollen die Arbeiten zu einer systembiologischen Betrachtung des Systems "Bakterienzelle" am Modell *Corynebacterium glutamicum* fortgesetzt werden. Ziel ist ein umfassendes, wenn möglich quantitatives und mechanistisches Verständnis des Stoffwechsels und der Regulation. Dazu sollen weitere Transkriptionsregulatoren, insbesondere solche des Zentralstoffwechsels, der Lipid-Biosynthese, der Atmungskette und der ATP-Synthase, identifiziert und charakterisiert werden, wobei die DNA-Microarray-Technologie eine zentrale Methode darstellt. Neben der Kontrolle auf Ebene der Genexpression sollen auch die Arbeiten zur Kontrolle des Stoffwechsels und des Wachstums durch Proteinphosphorylierung weitergeführt werden. Hier spielt die Proteomanalyse und die Massenspektrometrie von Proteinen eine zentrale Rolle. Auf Seite der angewandten Forschung sollen die gewonnenen Erkenntnisse zur Konstruktion neuer oder optimierter *Corynebacterium*-Stämme für die nachhaltige Produktion von Aminosäuren, aber auch von organischen Säuren und Aminen verwendet werden. Da in allen Fällen der effiziente Export der Metabolite in das Medium von großer Bedeutung ist, sollen auch die Arbeiten zur Biosynthese der Mycolsäuren und Glycane der Zellwand fortgesetzt werden.

Bei der Ganzzell-Biotransformation werden nichtwachsende Bakterien als Biokatalysatoren eingesetzt. Im Bereich der reduktiven Biotransformationen sollen die Systeme zur Cofaktor-Regeneration sowie der Transport von Substraten und Produkten verbessert werden. Im Bereich der oxidativen Biotransformationen soll das metabolische Potential von *Gluconobacter oxydans* weiter entwickelt werden sowie ein besseres grundlagenwissenschaftliches Verständnis des ungewöhnlichen Stoffwechsels in diesem Bakterium gewonnen werden, u.a. durch verstärkten Einsatz von Transkriptomics und Proteomics.

Gram-positive Bakterien werden im industriellen Maßstab zur Herstellung von extrazellulären Enzymen eingesetzt. Um die Sekretion verschiedener Proteine gezielt verbessern zu können, werden die molekularen Mechanismen des Proteinexports in verschiedenen gram-positiven Bakterien untersucht. Dabei liegen die

Schwerpunkte auf der Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen den Proteinen und dem Proteinsekretionsapparat, aber auch die globale Analyse der Stressantwort, die durch die Überproduktion von Proteinen und ihre Sekretion ausgelöst wird. Der letztgenannte Aspekt bietet dann auch Möglichkeiten zur gezielten Verbesserung der Wirtsstämme.

Durch Integration von Methoden der klassischen Bioverfahrenstechnik und der molekularen Bioverfahrenstechnik soll eine moderne Bioprozessentwicklung im Sinne einer Systembiotechnologie erreicht werden. Dabei spielt insbesondere die <sup>13</sup>C-Markierung von Schlüsselmetaboliten unter Produktionsbedingungen eine wichtige Rolle. Molekularbiologische Veränderungen des Stoffwechselnetzwerkes können so viel gezielter durchgeführt und unter praxisrelevanten Bedingungen (zum Beispiel auch unter wachstumsentkoppelter Produktbildung) verfolgt werden.

Neben der gerichteten Evolution von Enzymen wird auch die technische Evolution von Bioprozessen mit nicht natürlichen Katalysatoren, nicht natürlichen Stoffwechselwegen und nicht natürlichen Substraten eine immer größere Rolle spielen. Dabei kann die Bioverfahrenstechnik durch nicht natürlich hohe Konzentrationen und nicht natürliche Kompartimentierung Reaktionsabläufe erzwingen, die in der Natur nicht vorkommen.

- 
- [■ Detailergebnisse](#)
  - [■ Publikationen](#)
  - [■ Patente](#)
-

# Wissenschaftliches Rechnen

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

4 Schlüsseltechnologien

## 4.1 Wissenschaftliches Rechnen

4.1.1 Nationales Höchstleistungsrechenzentrum John von Neumann - Institut für Computing (NIC)

4.1.2 Computational Science, Algorithmen und Architekturen

4.1.3 Grid Computing

**Beteiligte Institute:** [JSC](#), [NIC](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert, ZAM, [th.lippert@fz-juelich.de](mailto:th.lippert@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlight

### Brand- und Evakuierungssimulationen

Brandsimulationen und die Modellierung großer Personenströme, wie sie bei Massenveranstaltungen und in großen Gebäuden auftreten, haben einen starken Bezug zur Praxis und sind ein zentrales Thema in der Sicherheitsforschung. Aktuelle Modelle der Fußgängerdynamik aus dem wissenschaftlichen und kommerziellen Bereich sind bisher für quantitative Aussagen nicht geeignet. Dies lässt sich sowohl auf die unsichere und widersprüchliche experimentelle Datenbasis als auch auf zu stark vereinfachte Modellierungskonzepte zurückführen. Gemeinsam mit der Universität Wuppertal werden in dem DFG-Projekt "Randeffekte und Nichtgleichgewichtszustände in der Fußgängerdynamik - Experiment und Modellierung" die Grundlagen für verfeinerte Fußgängermodelle erarbeitet. Im Jahre 2007 wurden im Rahmen dieses Projektes mehrere Promotionen initiiert, die sich neben Datenerfassung und -analyse mit neuen Modellierungskonzepten für die Fußgängerbewegung befassen. Aufbauend auf diesen grundlegenden Arbeiten im DFG-Projekt wurde im Rahmen des Sicherheitsforschungsprogramms des BMBF ein Antrag zu einem Verbundprojekt mit starker Industriebeteiligung eingereicht. Ziel ist es unter anderem, durch die parallele Nutzung von Cell-Prozessoren Simulationen großer Menschenmengen schneller als in Echtzeit zu ermöglichen und somit sicherheitsrelevante Prognosen in kürzester Zeit erstellen zu können. Als vorbereitende Arbeit für die Kopplung von Brand- und Evakuierungssimulationen wurden in Zusammenarbeit mit dem Ingenieurbüro insa4 Zugbrände in Bahnhöfen auf Jülicher Supercomputern simuliert. Eingesetzt wurde die unter Brandschutzingenieuren weit verbreitete Software Fire Dynamic Simulator (FDS), mit der auch eine Konvergenzstudie für hohe Gitterauflösungen beim Einsatz von "Large Eddy Simulation" (LES) erstellt wurde.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Das Hauptziel des Programms ist es, Wissenschaftler und Ingenieure in die Lage zu versetzen und sie dabei zu unterstützen, Aufgaben von höchster Komplexität im Wissenschaftlichen Rechnen zu lösen. In Ergänzung zu Theorie und Experiment hat sich das Wissenschaftliche Rechnen zu einer dritten Kategorie im wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn und zur Schlüsseltechnologie in der industriellen Produkt- und Produktionsoptimierung entwickelt. Die vom Forschungszentrum Jülich über das nationale

Höchstleistungsrechenzentrum John von Neumann-Institut für Computing (NIC) der Wissenschaft angebotenen Supercomputer stellen ein unverzichtbares Großgerät für die deutsche und europäische Forschung dar.

*Das John von Neumann - Institut für Computing (NIC, [www.fz-juelich.de/nic](http://www.fz-juelich.de/nic)), gemeinsam unterhalten von DESY, GSI und FZJ, ist ein herausragendes Beispiel von Kollaboration in Deutschland. Seine Einrichtungen in Jülich sind Teil des Programms Wissenschaftliches Rechnen im Forschungsbereich Schlüsseltechnologien, während seine Einrichtungen in Zeuthen Teil des Programms Elementarteilchenphysik im Forschungsbereich Struktur der Materie sind. Berechnungen und Datenspeicherung werden zwischen Jülich und Zeuthen verteilt, je nach Eignung der verschiedenen Computersysteme.*

Die ständige Weiterentwicklung der Simulationsmethodik, von parallelen Algorithmen und von neuen Programmier- und Visualisierungstechniken ist unabdingbar, um eine wirtschaftliche Nutzung der Supercomputer zu gewährleisten. Als Grundlage einer optimalen Unterstützung der wissenschaftlichen Nutzer muss zudem intensive Eigenforschung auf Kernfeldern der Computational Sciences getrieben werden. Die in allen Wissenschaftsbereichen wachsenden Datenflüsse von Beschleunigern, Satelliten und Experimenten stellen neue Herausforderungen an die Aufnahme, Speicherung und Darstellung von solchen Daten. Datenverbünde und internationale Supercomputernetze basieren auf dem modernen Konzept des Grid-Computing. Gezielte Forschungs- und Entwicklungsarbeiten in Bezug auf diese langfristigen Aufgaben sind ebenfalls unverzichtbar.

Das Helmholtz-Programm Wissenschaftliches Rechnen hat einen inhärent interdisziplinären Charakter, sowohl was die Beziehungen innerhalb des Forschungsbereichs als auch die zu anderen Forschungsbereichen betrifft. Das Programm zielt auf Supercomputing und Grid-Computing sowie auf die Entwicklung von Methoden, Werkzeugen und Anwendungen für diesen Zweck. Es trägt das John von Neumann-Institut für Computing in Jülich (NIC) und unterstützt die Forschungsarbeiten des Grid-Computing-Zentrums Karlsruhe (GridKa). Der High-Performance-Computing-Anteil (HPC) des Programms wird vom Jülich Supercomputing Centre (JSC, vormals Zentralinstitut für Angewandte Mathematik) und von der NIC-Forschungsgruppe "Computergestützte Biologie und Biophysik" des Forschungszentrums Jülich durchgeführt, der Grid-Anteil wird gemeinsam von Jülich und Karlsruhe realisiert. Das Programm Wissenschaftliches Rechnen mit seinen wissenschaftlichen Aktivitäten und der von ihm bereitgestellten wissenschaftlichen Infrastruktur hat eine wichtige Brückenfunktion zu anderen Forschungsbereichen der Helmholtz-Gemeinschaft und zu externen Forschern und Kooperationspartnern in vielen deutschen und internationalen wissenschaftlichen Einrichtungen.

Das Programm läuft vom 01.01.2005 bis 31.12.2009. Im Jahr 2007 gab es folgende strukturelle Veränderungen:

- Zum 01.10.2007 wurde das Jülicher "Zentralinstitut für Angewandte Mathematik" in "Jülich Supercomputing Centre (JSC)" umbenannt. Dies geschah in Anerkennung der Tatsache, dass sich der Aufgabenschwerpunkt des Instituts seit langem hin zum Betrieb einer leistungsfähigen Supercomputer-Infrastruktur und zu einer entsprechenden methodischen und fachlichen Forschung verschoben hat.
- Ende 2007 wurde im Forschungszentrum Jülich die Einrichtung des "Institute for Advanced Simulation" beschlossen und das JSC zum 01.01.2008 als Institutsbereich in das IAS eingegliedert.
- Gemeinsam mit der RWTH Aachen wurde die "German Research School for Simulation Sciences (GRS)" gegründet, die unter maßgeblicher Beteiligung des JSC einen Master-Studiengang und ein Promotionsprogramm im Bereich der Computer-Simulation anbieten wird.
- Anfang 2007 hat Herr Dr. Karl Jansen die Leitung der von DESY getragenen Forschungsgruppe Elementarteilchenphysik abgegeben. Als neuer Leiter wurde Prof. Dr. Zoltán Fodor ausgewählt.
- Im Rahmen der vorbereitenden Arbeiten zur Einrichtung einer europäischen High-Performance-Computing-Infrastruktur gründeten die deutschen nationalen Supercomputerzentren HLRS, LRZ und Jülich den "Gauss Centre for Supercomputing (GCS) e.V.", um sich in dieser Aufstellung gemeinsam am Aufbau einer europäischen HPC-Infrastruktur zu beteiligen.
- Im April 2007 nahm das von der Helmholtz-Gemeinschaft geförderte Virtuelle Institut "High-Productivity Supercomputing" die Arbeit auf. Es verbindet die am JSC angesiedelte Nachwuchsgruppe "Performance Analysis of Parallel Programs" mit Instituten der RWTH Aachen, der TU Dresden und der Univ. of Tennessee. Sprecher des Virtuellen Instituts ist Prof. Dr. Felix Wolf.

# Programmergebnisse

## Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

### Thema 1: Nationales Supercomputer-Zentrum John von Neumann-Institut für Computing (NIC)

In diesem Programmteil sind die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten des JSC für Betrieb und Weiterentwicklung der Supercomputer-Systeme im nationalen Supercomputer-Zentrum "John von Neumann-Institut für Computing (NIC)" enthalten.

**Rechnerbetrieb und Daten-Management:** Die große Nachfrage nach Rechenzeit auf dem Blue Gene/L System JUBL sowie das breite Spektrum von Anwendungen, die auf dieser Architektur gerechnet werden können, führten zur frühen Entscheidung des Forschungszentrums Jülich, das Leadership-Class Computing mit Blue Gene zu verstärken. Im Oktober 2007 wurde eine IBM Blue Gene/P mit 65536 Prozessoren installiert. Mit einer theoretischen Spitzenleistung von 223 TFlop/s und einer Linpack-Leistung von 167 TFlop/s war dieses System, genannt JUGENE (Jülich Blue Gene/P), im November 2007 der zweitschnellste Rechner weltweit. Erste Testrechnungen zeigten, dass reale Anwendungen aufgrund der gegenüber der Blue Gene/L verbesserten Architektur einen prozentual höheren Anteil der Spitzenleistung abrufen können. Die Nutzung eines gemeinsamen General-Parallel-File-Systems (GPFS), verwaltet vom IBM p690 Cluster JUMP (Jülich Multiprocessor) für die im JSC installierten Supercomputer JUMP, JUBL und JUGENE sowie die unterschiedlichen Anforderungen an diese Systeme führten vermehrt zu Abhängigkeiten und Einschränkungen. Deshalb wurde im Sommer 2007 ein dedizierter Fileserver, genannt JUST (Jülich Storage Cluster), mit einer Plattenplatzkapazität von einem PByte installiert und in Betrieb genommen. Damit konnten die Abhängigkeiten aufgelöst und genügend Plattenplatzkapazität für das JUGENE System bereitgestellt werden. JUST übernimmt von JUMP die Fileserver-Funktionen für das lokale GPFS. Der Zugriff auf den Jülicher Teil des internationalen Dateisystems im DEISA-Verbund wird weiterhin durch JUMP realisiert.

Um den gestiegenen Anforderungen für Datensicherung und Migration gerecht zu werden, wurden in den Robotersystemen 15 weitere Bandstationen installiert.

Das IBM Blue Gene/L System JUBL wurde im Jahr 2007 von etwa 30 Forschergruppen ausschließlich für Capability Computing-Anwendungen genutzt und zeigte dabei eine Auslastung von knapp 90%. Der Anfang 2004 in Betrieb genommene IBM-Supercomputer JUMP ist weiterhin als General-Purpose Supercomputer mit hoher Auslastung und Verfügbarkeit für etwa 150 nationale und internationale Projekte aus den computergestützten Wissenschaften im Einsatz. Dieses System soll Mitte 2008 durch ein skalierbares Cluster ersetzt werden.

**Cluster Computing:** Zur weiteren Untersuchung des Potentials von Cluster-Architekturen für den Aufbau skalierbarer General-Purpose Supercomputer wurde das Projekt JUROPA (Jülich Research on Petaflops Architectures) mit den Partnern FZJ/JSC, IBM, Intel, ParTec und Quadrics gestartet. Basierend auf Intel-Prozessoren und Quadrics-Netzwerken wurde ein IBM-Testsystem mit 16 Knoten installiert. Als Betriebssoftware wird die Cluster-Middleware ParaStation eingesetzt. Erste Resultate waren so vielversprechend, dass sich die Planung für ein JUMP-Nachfolgesystem auf diesen Architektorentwurf konzentriert.

In Zusammenarbeit mit der Firma IBM wurde das Cell-basierte Cluster JUICE (Jülich Initiative Cell Cluster) mit 24 Cell Broadband Engines in 32-bit Floating Point-Architektur, die zusammen eine Spitzenleistung von 4,9 TFlop/s erreichen, in Betrieb genommen und evaluiert. Erste Ergebnisse wurden im Mai 2007 im Rahmen eines Workshops mit internationaler Beteiligung diskutiert und in einem Bericht dokumentiert. Im Laufe des Jahres 2008 sollen Cell-Prozessoren mit 64-bit Floating Point-Architektur zur Verfügung stehen. Die Kapazität des SoftComp Clusters, das vom JSC als Service-Provider für das Network of Excellence "Soft Matter Composites" betrieben wird, wurde durch den Ausbau um insgesamt 60 Knoten annähernd verdoppelt. 8 Knoten wurden durch den industriellen Teilnehmer "Schlumberger Cambridge Research Limited" finanziert, der deutlich größeren Anteil, der zudem mit einem schnellen InfiniBand-Netzwerk ausgestattet ist, wurde aus Mitteln des Projekts D-Grid realisiert.

Das NICole-Cluster, das für die NIC Forschungsgruppe "Computational Biology and Biophysics" betrieben wird, wurde im Sommer um 8 Knoten erweitert. Zum Ende des Jahres wurden weitere 16 Knoten beschafft, die temporär mit jeweils 2 Dual-Core Opteron Prozessoren ausgestattet sind. Diese werden durch entsprechende Quad-Core Prozessoren ersetzt, sobald diese bei AMD verfügbar sind. Beide Erweiterungsstufen verwenden ein schnelles InfiniBand Netzwerk.

Das Projekt JULI (Jülich Linux Cluster) wurde zum Jahreswechsel 2006/2007 formal beendet, der zugehörige Rechner jedoch für Forschungs- und Entwicklungsarbeiten weiterhin betrieben. Die Ergebnisse sind in einem Projektbericht niedergelegt.

**Netzwerk:** Für den Um- und Ausbau des Supercomputerkomplexes wurde im Berichtsjahr ein neues Hochgeschwindigkeitsnetzwerk so geplant und implementiert, dass zu jedem Zeitpunkt eine den Kommunikationsanforderungen angepasste Leistung bereitstand. Die Anbindung der Rechner JUGENE, JUBL und JUMP an den Storage-Cluster JUST wurde über einen Force10 Switch mit 192 10-Gigabit Ethernet Ports realisiert und optimiert. Der neu konzipierte, aus sieben Switches bestehende Netzwerkkern des Supercomputerkomplexes wurde in das Netzwerkmanagement und monitoring integriert. Auch der Ausbau der Netzwerk- und Sicherheitsinfrastruktur für die Anbindung an den Campus und an externe Netze wurde weiter vorangetrieben. So wurde zum Jahreswechsel 2007/2008 eine Erhöhung der Anschlussbandbreite an das X-WiN auf 5 Gbit/s durchgeführt.

**Anwenderunterstützung:** Der Schwerpunkt der Anwenderunterstützung lag im Berichtsjahr auf der Portierung und Optimierung von hoch skalierenden Anwendungen auf JUBL. Stellvertretend seien hier Projekte aus der Turbulenzforschung (TU Ilmenau, RWTH Aachen) und der Astrophysik (Universität Heidelberg) erwähnt, die darüber hinaus auch bei der Visualisierung ihrer Simulationsergebnisse unterstützt wurden. Daneben wurde das Software-System HDF5 zum Verwalten extrem großer und komplexer Datensammlungen auf JUMP und JUBL verfügbar gemacht, sowie mit der Entwicklung einer Software-Bibliothek für parallelen I/O auf Blue Gene Architekturen begonnen.

Im Rahmen der "DEISA Extreme Computing Initiative (DECI)" konnten die in 2006 ausgewählten Projekte ihre Rechnungen auf JUMP ausführen. Auch 2007 fand wieder ein DECI-Auswahlverfahren statt. Dabei wurden von den europaweit 63 eingereichten Vorschlägen 45 akzeptiert, darunter drei der acht Anträge, die aus der Nutzerschaft des NIC kamen. Im Rahmen des EU-Infrastrukturprojektes I3HP führt eine Gruppe von Hadronphysikern weiterhin ihre Simulationsrechnungen auf JUMP durch. Die Rechenzeit wird von der EU gefördert.

Parallel dazu veranlasste 2007 die inzwischen gut bekannte NIC-Initiative zur Förderung des Wissenschaftlichen Rechnens in Europa insgesamt 22 Wissenschaftlergruppen aus zwölf meist europäischen Staaten Rechenzeit auf JUMP und JUBL zu beantragen. Die ursprünglich auf die neuen Mitgliedsstaaten der EU ausgerichtete Initiative wurde erweitert und steht nun im Prinzip allen Wissenschaftlergruppen offen, die herausragende Projekte in den computergestützten Wissenschaften bearbeiten und in ihrem Heimatland nicht oder nicht ausreichend über Supercomputer-Ressourcen verfügen.

**Visualisierung:** Zur 3D-Darstellung wissenschaftlicher Daten wurde in der VR-Rotunde des JSC ein dreikanaliges Passiv-Stereo Projektionssystem realisiert, das eine 10m lange, zylindrisch gebogene Leinwand als Präsentationsfläche nutzt. Auf das zum Betrieb des Projektionssystems notwendigen Render-Cluster wurden - nach Aufbau und Inbetriebnahme - bestehende Visualisierungsanwendungen portiert und dort demonstrationsfähig gemacht.

Im Rahmen des HFSP-Projekts zur interaktiven Strukturanalyse großer Biomoleküle wurden Cartoon-Render Algorithmen für die Visualisierung von Molekülstrukturen implementiert und in das bestehende Software-Paket Sculptor integriert. Durch die Auslagerung von Berechnungen auf programmierbare Grafikchips (GPUs) konnten hohe Bildraten erreicht werden. Verschiedene Visualisierungsanwendungen konnten durch die Einbeziehung des im Rahmen des Projekts VIOLA/KODAVIS entwickelten Kollaborations- und Daten-Servers optimiert werden.

**Weiterentwicklung des Großgerätes:** Zur Vorbereitung konkreter Upgrade-Pläne für das Supercomputersystem JUMP wurden 2007 gemeinsam mit industriellen Partnern im Rahmen des Projekts JUROPA Entwicklung, Installation und Betrieb eines Prototyp-Clusters erfolgreich realisiert. Dabei hat sich die Idee entwickelt, dieses Projekt zu erweitern und aus innovativen Komponenten (Prozessor, Netzwerk, Cluster-Betriebssoftware) mit Hilfe eines System-Integrators ein großes Produktions-Cluster aufzubauen und als JUMP-Nachfolger zu betreiben. (Weitere Aktivitäten sind in Abschnitt 3: "Weitere Programmentwicklung" dargestellt.)

## **Thema 2: Computational Science, Algorithmen und Architekturen**

Die Aktivitäten zu diesem Thema konzentrieren sich auf disziplinäre Forschung auf einem breiten Spektrum der Naturwissenschaften (atomistische Modellierung, Quantenchemie, Quanteninformationstheorie, Elementarteilchenphysik und Biophysik) sowie auf die komplementären Querschnittsfelder Angewandte Mathematik (Modellbildung und Kernalgorithmen) und Computer Science (Leistungsanalyse). Ein gemeinsamer Schwerpunkt aller Forschungsaktivitäten ist die Entwicklung und Bereitstellung skalierbarer Algorithmen und Anwendungen auf Höchstleistungsrechnern, ein Fokus der Ende 2007 mit der Installation des neuen 223 TFlop/s Blue Gene/P Rechners JUGENE noch verstärkt wurde. Um die wissenschaftlichen Aktivitäten in der regionalen Forschungslandschaft besser zu verankern, wurden neben zahlreichen informellen Kooperationen zwei neue Rahmenverträge mit der RWTH Aachen und der Universität Bonn unterzeichnet. Das internationale Profil des JSC wurde durch eine Reihe von Konferenzen, Workshops und

Tutorials zum Thema Wissenschaftliches Rechnen gestärkt, u. a. durch die Organisation und Ausrichtung der internationalen Konferenz "Parallel Computing" (ParCo 2007) in Jülich, des Dagstuhl-Seminars "Code Instrumentation and Modeling for Parallel Performance Analysis" und den NIC-Workshop "From Computational Biophysics to Systems Biology".

### Disziplinäre Kernfelder

**Komplexe atomistische Modellierung und Simulation:** Eine Kernaktivität dieser Arbeitsgruppe liegt in der Entwicklung und Bereitstellung von schnellen Verfahren zur Berechnung von langreichweitigen Wechselwirkungen in atomistischen Systemen. Die Bibliothek für schnelle Coulomb-Löser, die momentan ein Barnes-Hut-Verfahren, eine schnelle Multipolmethode (FMM - s. Angew. Math.) und Ewald-Summation beinhaltet, wurde weiter optimiert und für verschiedene Plattformen zur Verfügung gestellt. Weiterhin wurde begonnen, die Bibliothek auf parallele Methoden zu erweitern. Eine erste parallele Bibliotheksversion des BH-Codes ist bereits in der Lage, Kräfte und Potential von mehr als einer Million Teilchen pro Sekunde auf dem JUMP-System zu berechnen. Diese Arbeit soll in Zukunft innerhalb eines großen Verbundprojektes, das in der Begutachtungsphase ist, intensiviert werden. Für kurzreichweitige Wechselwirkungen wurde ein neues paralleles Programm erstellt, das Molekulardynamik an mesoskopische Flüssigkeitsmodelle koppelt und dadurch hydrodynamische Effekte in großen Teilchensystemen berücksichtigt. Durch eine effiziente Gebietszerlegung konnte bereits eine Skalierung bis 2048 Prozessoren erzielt werden. Ein Wavelet-Verfahren, das ursprünglich zur Berechnung von Coulomb-Wechselwirkungen in Teilchensystemen entwickelt wurde, wurde auf den Cell-Prozessor portiert, wobei durch Anpassung des Algorithmus an die verfügbare Speichergroße ein deutlicher Performance-Gewinn erzielt werden konnte. Im Bereich Mehrgitterverfahren wurde eine Theorie zu spektral äquivalenten Grobgitter-Operatoren entwickelt. Ein geometrisches Mehrgitterverfahren, das ebenfalls zur Lösung des Coulomb-Problems entwickelt wurde, wurde auf diese Operatoren erweitert, die eine effiziente Darstellung finiter Differenzensterne höherer Ordnung erlauben. Eine Parallelisierung dieses Verfahrens zeigte für "weak scaling" eine Skalierbarkeit bis 8192 Prozessoren. Im Bereich Nichtgleichgewichts-Thermodynamik wurden Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt, die mit Hilfe von Fluktuationstheoremen die Bestimmung der freien Energie zwischen verschiedenen Zuständen eines Systems erlauben. Hierzu wurde ebenfalls eine analytische Modellierung entwickelt, die die Korrektheit der Theoreme für lineare Systeme zeigt und ebenfalls die Relaxation zwischen Prozessen beinhaltet. In Zusammenarbeit mit dem Rutherford-Appleton Laboratory und der Friedrich-Schiller-Universität Jena wurde mit Hilfe des parallelen BH-Codes PEPC-B ein neues Schema zur Laserbeschleunigung von Protonenstrahlen mit Microdot-Targets untersucht.

**Quantenchemie:** Die Programmpakete COLUMBUS (MRCI) und TURBOMOLE (DFT) bilden die Basis sowohl für Programmentwicklungsarbeiten als auch Anwendungen. Mit dem parallelen MRCI-Code, der das gesamte JUMP-System effektiv nutzt, wurde die Grundzustandspotenzialkurve des Chrom-Dimers berechnet. Die MRAQCC/DKH-basierten Resultate für diesen extrem schwierigen und bis vor kurzem mit Ab-initio-Verfahren nicht zufrieden stellend zu behandelnden Fall stimmen ausgezeichnet mit den experimentellen Daten überein. Im Gegensatz hierzu liefern störungstheoretische Verfahren systematische Fehler, wohingegen IC-MRCI die Dissoziationsenergie unterschätzt. Innerhalb des COST-D37-Verbunds wurden Ergänzungen für die Simulation von Umgebungseffekten (elektrostatische Einbettung) für Energie und Gradienten auf MCSCF- und MRCI-Niveau implementiert. Erste Anwendungen betrafen die Lösungsmittelabhängigkeit elektronischer Anregungsenergien. Die Untersuchung des Lösungsmiteleinflusses auf photodynamische Prozesse ist geplant. Im Herbst 2007 wurde gemeinsam mit den TURBOMOLE-Entwicklern die Jülicher Version mit der Version 5.9 zusammengeführt und aktualisiert. Die parallele Version unterstützt u. a. Hybridfunktionale und ein Kontinuum-Solvensmodell. Die Beendigung der Arbeiten zur parallelen Unterstützung von analytischen zweiten Ableitungen wie auch die Behandlung angeregter Zustände (TDDFT) hängen von noch auszuhandelnden Vereinbarungen mit den TURBOMOLE-Entwicklern ab.

**Quanteninformationstheorie:** Im Rahmen einer Erweiterung des Massiv Parallelen Quantencomputer Simulators wurden detaillierte Parameterstudien realistischer Anwendungsfälle durchgeführt. Mittels aufwendiger stochastischer Simulationen konnte u. a. für die Quanten-Fourier-Transformation (QFT) und Grover's Suchalgorithmus die Abhängigkeit der Fehlersensitivität von der Größe des genutzten Quantenregisters quantifiziert werden. Hierbei wurde das Zusammenspiel verschiedener Fehlerquellen analysiert und die Robustheit beider Algorithmen auf vergleichbaren Systemgrößen untersucht. Zur Fehlerkorrektur wurden der 9-Qubit (Shor) Code, der 7-Qubit (Steane) Code und der minimale 5-Qubit Code implementiert. Die Fehlertoleranz bezüglich operationaler und Dekohärenzfehler konnte im Falle des 7-Qubit Codes durch aufwendige Simulationen unterhalb einer bestimmten Fehlerschwelle nachgewiesen werden. Darüber hinaus wurden Effizienzanalysen von fehlertoleranten Implementierungen einfacher Algorithmen durchgeführt. Das Programmpaket zur dynamischen Simulation von Ionenfallen-Quantencomputern wurde

weiterentwickelt. In Zusammenarbeit mit den Experimentatoren in Innsbruck (Arbeitsgruppe Prof. Blatt) soll durch realistische Simulationen der experimentelle Aufbau verbessert werden. Für die DEISA Benchmark-Suite wurde eine reduzierte Version des Simulationscodes für ideale Quantencomputer entwickelt und als Benchmarktest in die Test-Suite aufgenommen.

**Gitter-Elementarteilchenphysik:** Simulationen der Gitter-QCD mit dynamischen Overlap-Fermionen ermöglichen Einblicke in die Mechanismen der dynamischen chiralen Symmetriebrechung, die von grundlegender Bedeutung für das beobachtete Teilchenspektrum ist. Solche Simulationen werden durch den am JSC entwickelten und im Laufe des Jahres verbesserten HMC-Code auch bei großen Gittern und kleinen Quarkmassen möglich. Berechnungen von Matrixelementen, die zur Abschätzung der CP-Verletzung im Standardmodell dienen (einer notwendigen Bedingung zur Erklärung der Materie-/Antimaterie-Asymmetrie im Universum), benötigen jedoch größere Gitter als sie mit dynamischen Overlap-Fermionen mit gegenwärtigen Computern erzeugt werden können. Im Rahmen von sog. Mixed-Action-Simulationen können jedoch die aufwändigen Teile der Simulation durch die signifikant weniger aufwändigen Clover-Fermionen ersetzt werden. Mit Hilfe der chiralen Störungstheorie können die Observablen bestimmt werden. Die erzeugten Konfigurationen eignen sich weiterhin für eine Reihe anderer Anwendungen, so zum Beispiel für die präzise Bestimmung des Hadron-Spektrums. Die Produktion der Konfigurationen wird auf den Jülicher Systemen Blue Gene/P (JUGENE) und Blue Gene/L (JUBL) durchgeführt. Die Algorithmen wurden dazu auch auf die Blue Gene/P portiert. Dabei wird eine hervorragende Effizienz von 36.8% erreicht (ca. 80 TFlops sustained auf der ganzen Maschine).

**Computergestützte Biologie und Biophysik (NIC-Forschungsgruppe):** Seit dem 1. Juli 2005 erforscht die Gruppe unter Leitung von Prof. Dr. Ulrich Hansmann die Faltung und Wechselwirkung von Proteinen, um auf diese Weise die molekularen Grundlagen der fundamentalen Prozesse in menschlichen und anderen Zellen zu verstehen. Die vielfältigen Funktionen der Proteine hängen von deren exakter Gestalt ab, und falsch gefaltete Proteine sind die Ursache vieler Krankheiten. Der Prozess, bei dem sich ein Protein in diese spezifische Struktur faltet, ist bisher nur unzureichend verstanden. Ein wesentlicher Schwerpunkt der Arbeit der Forschungsgruppe ist daher die Entwicklung von effizienten Algorithmen, die es ermöglichen, den Faltungsprozess auf dem Computer zu simulieren. Es wurden neue Techniken (z. B. parallel tempering, generalized-ensemble Algorithmen) entwickelt und an ausgewählten Proteinen getestet. Diese Methoden sind Bestandteil des Open-Source Software Paketes SMMP, eines der wenigen einfach zugänglichen und kostenlosen Programme, das effizient die Rechenleistung von mehreren Tausend Prozessoren nutzen kann, wie sie in heutigen Supercomputern üblich sind. Der zweite Schwerpunkt ist die Anwendung dieser Methoden zur Untersuchung molekularbiologischer Fragestellungen. Dabei hat sich im Gegensatz zum vorherigen Jahr die Gruppe nicht auf die Vorhersage der funktionalen Gestalt eines Proteins konzentriert sondern auf den Prozess der Faltung selber. Dabei wurde ein neuer Faltungsmechanismus entdeckt, bei dem eine bestimmte Klasse von Proteinen die Gefahr einer fehlerhaften Faltung durch "caching" des gefährdeten Segmentes vermeidet und dabei dessen "Chamäleon-Charakter" ausnutzt. Diese Untersuchungen sind nicht nur von theoretischem Interesse, sondern haben Auswirkungen auf das Design neuer Proteine mit maßgeschneiderten Funktionen. Die Arbeiten der Gruppe wurden auch auf dem internationalen Workshop "From Computational Biophysics to Systems Biology" vorgestellt, den die Gruppe im Mai 2007 zum zweiten Mal im FZJ organisiert hat und der von etwa 120 Teilnehmern besucht wurde.

#### Querschnittsfelder

**Angewandte Mathematik:** Zentrale Aufgaben dieses Bereiches sind die mathematische Modellbildung sowie die Bereitstellung effizienter paralleler Implementierungen von Kernalgorithmen, die in vielen Anwendungsbereichen von strategischer Bedeutung sind. Die Entwicklung einer parallelen Bibliothek für iterative Eigenwertverfahren wurde fortgeführt und um die Behandlung von verallgemeinerten normalen Eigenwertaufgaben erweitert. Die Fast Multipole Method (FMM) wurde methodisch auf Systeme mit periodischen Randbedingungen erweitert. Ein Renormalisierungsansatz zur Berechnung der Gittersumme von Systemen mit ein-, zwei- und dreidimensionaler Periodizität wurde genutzt, um lineare Skalierung bezüglich der Teilchenanzahl zu ermöglichen. In diesem Zusammenhang wurde die für offene Systeme entwickelte Fehleranalyse auf periodische Systeme erweitert. Auf dem Cell-Cluster JUICE wurde ein paralleles Programm für Matrix-Matrix-Multiplikation basierend auf MPI implementiert. Da die Berechnungen und die MPI-Kommunikation auf der Cell-Architektur unabhängig bearbeitet werden, konnte bei hinreichend großen Matrizen die Kommunikation fast vollständig durch Rechenarbeit überlagert werden, so dass eine hohe parallele Performance erreicht wurde. In Kooperation mit dem ICG-4 wurde das mikroskopische Modell für die Wasseraufnahme durch Wurzeln mit dem makroskopischen Modell für den dreidimensionalen Wasserfluss im Boden gekoppelt. Der Einfluss verschiedener Kopplungsansätze wurde für einen großen Bereich physiologischer Parameter untersucht. Um weitere Grundlagen für die Kopplung von Brand- und Evakuierungssimulationen zu erarbeiten, wurde das Konvergenzverhalten der Software FDS bei der

Simulation turbulenter Rauchgase insbesondere beim Einsatz von "Large Eddy Simulation" (LES) untersucht. Überraschenderweise zeigte sich bei praxisrelevanten Szenarien, dass sich bei Standardeinstellungen der LES-Parameter und hoher Gitterauflösung kein konvergentes Verhalten erzielen lässt. Um die Nutzung von FDS bei hohen Gitterauflösungen zu ermöglichen, wird detailliert untersucht, inwieweit das konvergente Verhalten abhängig vom Grad der Turbulenz, von der Entfernung zu Randschichten und den gewählten LES-Parametern ist.

**Computer Science, Leistungsanalyse:** Das speziell für hochskalierbare Systeme entwickelte Leistungsanalysewerkzeug SCALASCA wurde um ein Modul zur summarischen Leistungsmessung erweitert und die Skalierbarkeit der Messung durch eine effizientere Zusammenfassung lokaler Leistungsdaten weiter optimiert. Zur Reduktion von Messdaten und zur Erhöhung der Genauigkeit wurde ein Mechanismus zur selektiven Instrumentierung geschaffen. Um diesen möglichst einfach verwenden zu können, wurde ein Workflow-Manager zur schrittweisen Erfassung von Leistungsdaten prototypisch implementiert. Aufgrund unzureichend synchronisierter lokaler Uhren entstandene Fehler in der logischen Reihenfolge verteilter Ereignisse können nun auch für große Prozessoranzahlen nachträglich korrigiert werden. Die Analysekomponente wurde um weitere zu diagnostizierende Leistungsmerkmale ergänzt. Außerdem wurde eine Komponente zur Erfassung einfacher Interprozess-Metriken geschaffen, die mit Hilfe des Statistikpakets R auch für große Prozessorzahlen dargestellt und weiterverarbeitet werden können. Die Skalierbarkeit der zu SCALASCA gehörenden Präsentationskomponente CUBE konnte durch den Einsatz effizienterer Aggregationsalgorithmen und Datenstrukturen optimiert werden. Ferner ist es nun möglich, mit Hilfe eines zurzeit noch sequentiellen Werkzeugs eine Merkmalspur zu erzeugen, die die in den Ereignisspuren gefundenen Muster ineffizienten Verhaltens enthält und die mit Hilfe von VAMPIR sowohl visuell als auch statistisch analysiert werden kann. Der Arbeitsbereich Leistungsanalyse ist seit dem Start des Programms Wissenschaftliches Rechnen durch die Einrichtung einer Helmholtz Hochschulnachwuchsgruppe und eines Virtuellen Instituts sowie die Einwerbung weiterer Drittmittel von 2 auf 8 Personen gewachsen.

### Thema 3: Grid Computing

Grid-Computing ist eine Schlüsseltechnologie, die Wissenschaftler in Forschung und Wirtschaft dabei unterstützt, komplexe Probleme zu lösen und in neuartiger Weise zusammenzuarbeiten. Grids integrieren über schnelle Netze verbundene Rechnerressourcen mit Daten aus Experimenten und Simulationsrechnungen und ermöglichen die Visualisierung und Speicherung der Ergebnisse an verschiedenen Orten. Die so geschaffene Wissensumgebung erlaubt es virtuellen Organisationen, Forschungs- und Entwicklungsarbeiten mit hoher Effizienz durchzuführen. Grids bilden das Fundament für e Science (enhanced Science).

Im Mai 2007 fand zum dritten Mal das Grid-Kolloquium der beiden am Programm beteiligten Einrichtungen in Karlsruhe statt. Teilnehmer der Forschungszentren Karlsruhe und Jülich (FZK und FZJ) präsentierten ihre durchgeführten Arbeiten.

Das Forschungszentrum Jülich führte seine Entwicklungsarbeiten und Forschungsaktivitäten zur Grid-Middleware UNICORE im Berichtszeitraum fort. Im Vordergrund der Arbeiten im Jahr 2007 stand die Veröffentlichung der Web-Services-basierten, OGSA-kompatiblen Version UNICORE 6 auf <http://www.unicore.eu>. Nach den Alpha-Versionen wurde Ende April das erste Beta Release zum Download bereit gestellt, welches insgesamt über 1500-mal herunter geladen wurde. Die Vorabversionen der einzelnen Komponenten enthielten bereits alle grundlegenden Serverkomponenten, wie XNJS, XUADB und Gateway, und ebenso die Unterstützung für "explicit trust delegation" und Proxy-Zertifikate. Die Unterstützung zur Dienste-Registrierung und -Entdeckung wurde verbessert und die verwendete Basissoftware WSRFlite auf Jetty 6 aktualisiert. Das Client-Paket enthält den GPE4UNICORE Client, der mit einem Script GridBean zur Submission von HPC-Jobs ergänzt wurde. Anfang Juli wurde der Release Candidate veröffentlicht, der gegenüber dem Beta-Release um einen Kommandozeilen-Clients UCC, ein neues Sicherheitsschema mit "message level security" sowie einen verbesserten File-Transfer basierend auf dem OGSA BytelO Standard ergänzt wurde. Nach weiteren sechs Wochen wurde Mitte August das offizielle Release 6.0 fertig gestellt. Es enthält den UNICORE-typischen, integrierten, kompletten Grid Software Stack, eine schnelle Job-Prozessierungs-Einheit, verschiedene Clients und implementiert die Standards WSRF 1.2, JSDL 1.0, OGSA BytelO sowie SAML und XACML im Sicherheitsbereich. Eine erste Revision wurde Ende November mit der Version 6.0.1 herausgegeben. Die finale Version 6.0.x wurde bisher über 1800-mal herunter geladen. Parallel zur Software wurden darüber hinaus zahlreiche Übungsmaterialien und Dokumentationen zu UNICORE 6 ins Netz gestellt. Noch kurz vor Jahresende wurden zusätzliche Komponenten, die im Rahmen des EU-Projektes OMII-Europe entwickelt wurden und die die elementaren Standards OGSA-BES und SAML-based VOMS im Grid-Bereich implementieren, zur Verfügung gestellt.

Die Arbeiten im Forschungsprogramm wurden auch 2007 durch zahlreiche nationale und europäische Drittmittelprojekte verstärkt. Im Berichtszeitraum wurde das vom JSC koordinierte BMBF-Projekt VIOLA erfolgreich abgeschlossen; im Projekt wurden Entwicklungsarbeiten zu neuen Netzwerk-Technologien, zu verteilten Anwendungen sowie zur Integration von Co-Allocation von Compute- und Netzwerk-Ressourcen in UNICORE durchgeführt.

Weiterhin wurden die Arbeiten an laufenden FE-Projekten fortgesetzt. Im EU-Projekt DEISA, dem europäischen Supercomputer-Grid, wurden u. a. im Berichtszeitraum alle Partner an das 10 Gbit/s Netz angeschlossen, womit das bisherige 1 Gbit/s Netz abgelöst wurde; diese Arbeiten werden vom JSC koordiniert. Im Rahmen des eDEISA Ergänzungsprojektes wurden vom JSC Arbeiten zur Evaluation einzelner Komponenten des Globus Toolkit 4, darunter vor allem GridFTP, durchgeführt. Weiterhin wurde das UNICORE-Werkzeug SIMON (Site MONitor) entwickelt und in den DEISA-Produktionsbetrieb zur Überwachung der UNICORE-Installationen integriert, so dass im Fehlerfall automatische Benachrichtigungen per Email versendet werden. Für die Deisa-Benchmark-Suite wurde die im JSC entwickelte Benchmark-Umgebung Nbench angepasst und es wurden die beiden Applikationen PEPC und IQCS integriert. Die bei der Jülicher Trainingsveranstaltung vielversprechend eingeführten UNICORE Handson Sessions zur Benutzung von UNICORE wurden bei den Trainingsveranstaltungen in Barcelona, Helsinki und Bologna erfolgreich wiederholt.

Die Arbeiten im EU-Projekt OMII-Europe wurden sehr erfolgreich fortgeführt. Dabei wurden zahlreiche Standards, z.B. OGSA-BytelO, OGSA-BES, JSDL, HPC-P und OGSA-RUS, sowie eine Unterstützung für SAML-basierte VOMS Dienste in UNICORE 6 integriert. Diese zunächst als Alpha- und Beta-Versionen verfügbaren UNICORE Ergänzungen werden spätestens mit Abschluss des Projektes im Sommer 2008 in der endgültigen Version vorliegen und dann in UNICORE 6 verfügbar sein. Mit großem Erfolg wurden diese Entwicklungen auf zahlreichen Konferenzen, Symposien und Tagungen demonstriert und somit eine große internationale Sichtbarkeit erzielt. Ein Teil der Projektarbeiten beinhaltet auch ein starkes Engagement im internationalen Grid-Standardisierungsgremium Open Grid Forum (OGF). Hierbei wurde die Position des Secretary der Grid Interoperation Now Gruppe (GIN) sowie des Co-Chairs der OGSA-RUS Gruppe im OGF übernommen und in zahlreichen weiteren Gruppen aktiv mitgearbeitet. Darüber hinaus wurde ein Teil der im Projekt vorhandenen Evaluation Infrastructure, bestehend aus einem kleinen Cluster, zur Untersuchung der entwickelten Komponenten in Jülich installiert und betrieben.

In den Projekten CoreGRID und NextGRID hat das FZJ sein Engagement erfolgreich fortgesetzt und dabei primär in den Bereichen Scheduling und Management von Ressourcen sowie im Bereich Informationsdienst sowohl Forschungs- als auch Entwicklungsarbeiten geleistet. Besonders im Fokus standen hier Service Level Agreements (SLAs) für Grids sowie Scheduling-Architekturen, die UDAP Software-Komponente zur Haltung dynamischer Informationen über Aktivitäten in Grid-Umgebungen sowie ein allgemein verwendbarer Informationsdienst, der im 1. Quartal 2008 in die UNICORE 6 Basissoftware eingehen wird. Im Rahmen des EU-Projektes EGEE-II wurden Komponenten zum direkten Job-Austausch, der sog. Interoperation, zwischen der gLite Middleware und UNICORE entwickelt. Diese Funktionalität wurde erfolgreich auf der EGEE'07 Konferenz sowie der Supercomputing 07 präsentiert. In EGEE-II sind das FZK und FZJ in der deutsch-schweizerischen EGEE-Föderation zusammengeschlossen. Das EU-Projekt A-WARE wurde planmäßig fortgeführt. Einige der hier durchgeführten Arbeiten sind Ausgangspunkte für weitere, längerfristige Entwicklungen im UNICORE-Kontext. In diesem Zusammenhang sind HiLA (High Level API for Grid Applications) zur Vereinfachung von Aufrufen an verschiedene Middlewares und UNICORE/w3, eine auf Web 2.0 Technologien basierende Fassade von UNICORE 6, zu nennen. Im EU-Projekt Chemomomentum wurden die Arbeiten zur Workflow-Unterstützung sowie die Entwicklung der Eclipse-basierten Klientensoftware fortgesetzt. Erste Versionen der Software standen Mitte des Jahres den Projektpartnern zur Verfügung. Sowohl das Workflow-System als auch der Eclipse-Klient werden in die Basis-UNICORE-Software integriert werden.

Im EU-Projekt Phosphorus wurden der VIOLA-MetaScheduler und eine verteilte kollaborative Visualisierungsanwendung an UNICORE 6 angebunden. Bei einem erfolgreich absolvierten Projekt-Review konnte das Zusammenwirken dieser Komponenten zur anwendungsgesteuerten dynamischen Reservierung optischer Netzwerkverbindungen demonstriert werden. Ab 2008 übernimmt das JSC zusätzlich die Koordinierung der deutschen Teile des optischen Testbetts.

Die D-Grid-Initiative hat sich zu einem Kristallisationspunkt für Grid und e-Science in Deutschland entwickelt. Die Forschungszentren Karlsruhe und Jülich (FZK und FZJ) sind an einer Reihe von D-Grid-Projekten beteiligt und stellen wesentliche Ressourcen und Dienste für die Infrastruktur des Kern-D-Grid zur Verfügung. Das FZK koordiniert das BMBF-Projekt D-Grid-Integrationsprojekt (DGI), in dem das FZJ die Arbeiten zum Aufbau einer Infrastruktur für alle Communities in Deutschland koordiniert. Zur Ressourcen-

Integration und Nutzerverwaltung wurden der zentrale Dienst Grid Resource Registry Service (GRRS) entwickelt und VOMRS Server aufgesetzt und betrieben. Für eine einheitliche Umgebung auf den D-Grid-Ressourcen wurden die Arbeiten zu einem Betriebskonzept initiiert und vorgebracht. Außerdem wurden ein Cluster gemäß den D-Grid-Richtlinien und ein dCache Speicherelement mit 4,3 PByte Bandroboter-Backend zur Verfügung gestellt. Die Arbeiten bzgl. UNICORE wurden planmäßig fortgeführt. Dabei wurden u. a. die Installationspakete zu UNICORE 5 kontinuierlich angepasst und den Communities bzw. Ressourcenanbietern in D-Grid zur Verfügung gestellt sowie ein erster D-Grid Workshop zu UNICORE 6 im Sommer veranstaltet. Die Arbeiten zu alternativen Transportprotokollen wurden erfolgreich abgeschlossen. Die Ergebnisse sind Grundlage für die begonnene Entwicklung eines neuen, hoch performanten Dateitransfer-Mechanismus für UNICORE 6. Zur Evaluation von Hochgeschwindigkeits-Firewalls wurden neue Testverfahren entwickelt und eingesetzt.

Im Berichtszeitraum startete das neue BMBF-Projekt D-MON im Rahmen der D-Grid-Initiative, in dem eine horizontale Integration des Ressourcen- und Dienste-Monitoring im D-Grid angestrebt wird. Ziel ist, die in den drei in D-Grid verwendeten Grid Middleware-Technologien vorhandenen Informationsdienste zu koppeln, so dass sich für den Benutzer eine einheitliche Sicht auf die in D-Grid verfügbaren Ressourcen ergibt. FZK und FZJ arbeiten in diesem Projekt eng zusammen.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Junge Menschen für wissenschaftliche Themen und technologische Herausforderungen zu begeistern, ist eine wichtige und mit Engagement betriebene Aufgabe des Programms. Studenten, Doktoranden und Postdocs werden auf ihrem Karriereweg unterstützt, indem sie eng in die Forschungsaktivitäten des Programms eingebunden werden. Der Leiter des JSC bekleidet den Lehrstuhl für Computergestützte Theoretische Physik an der Bergischen Universität Wuppertal. Dies ist eine wichtige Verbindung zu Universitäten und Studenten und ermöglichte auch die Steigerung der Anzahl von Diplomanden und Doktoranden. Entsprechendes gilt für die Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe zum Thema "Performance Analysis of Parallel Programs", deren Leitung mit einer Juniorprofessur an der RWTH Aachen verbunden ist. Außerdem wurde gemeinsam mit der RWTH Aachen die Besetzung einer W2-Professur zum Thema Quanteninformationsverarbeitung vorangetrieben.

In Kooperation mit der Fachhochschule Aachen werden der ausbildungsbegleitende duale Bachelor-Studiengang "Scientific Programming" sowie darauf aufbauend der Master-Studiengang "Technomathematik" angeboten. Die Neuordnung der Berufsausbildung zum "Mathematisch-technischen Softwareentwickler" durch das BMBF unter Mitwirkung von Sachverständigen des JSC wurde abgeschlossen. Wie bisher werden 30 Studentinnen und Studenten pro Jahr in Zusammenarbeit mit Instituten des FZJ sowie Partnerfirmen auf die Doppelqualifikation IHK- und Bachelor-Abschluss vorbereitet. Den besten Absolventen wird die Weiterqualifikation zum Master ermöglicht. Im Wintersemester 2007/08 wurde der Master-Studiengang mit 20 Studenten gestartet. Gemeinsam mit der RWTH Aachen wurde die "German Research School for Simulation Sciences (GRS)" gegründet, die exzellenten Studenten einen Master-Studiengang und ein Promotionsprogramm im Bereich der Computer-Simulation anbieten wird. Im zweijährigen Rhythmus werden internationale Winterschulen im Wissenschaftlichen Rechnen durchgeführt. 2007 begannen die Vorbereitungen für eine Schule, die Anfang 2009 stattfinden wird. In seinem jährlich durchgeführten Gaststudentenprogramm lädt das JSC Studenten, die kurz vor ihrem Diplom stehen, für zehn Wochen ein und beteiligt sie an seinen Forschungsarbeiten.

Beide Partner im Programm Wissenschaftliches Rechnen sind in großem Umfang an internationalen und nationalen Förderprojekten sowie Kooperationsprojekten mit der Industrie beteiligt. Insbesondere die großen Grid-Infrastrukturprojekte DEISA und OMII-Europe verstärkten die intensive Zusammenarbeit mit Forschern und Entwicklern aus vielen europäischen Ländern. Die Initiative des NIC zur Förderung der Computational Sciences in den neuen Mitgliedsländern der Europäischen Union wurde auf weitere Länder ausgeweitet.

Im Rahmen der Vorbereitungen zur Einrichtung einer europäischen High-Performance-Computing-Infrastruktur wurde das EU-Projekt PRACE, Partnership for Advanced Computing in Europe, erfolgreich beantragt, in dem die interessierten Länder die rechtlichen, organisatorischen, finanziellen und technischen Grundlagen für eine solche Infrastruktur schaffen wollen. Im gleichen Zusammenhang haben sich die deutschen nationalen Supercomputerzentren HLRS, LRZ und Jülich formal im "Gauss Centre for Supercomputing (GCS) e.V." zusammengeschlossen, um sich in dieser Aufstellung gemeinsam um europäische Fördermittel zu bewerben.

# Weitere Programmentwicklung

## Thema 1: Nationales Höchstleistungsrechenzentrum John von Neumann-Institut für Computing (NIC)

Die Weiterentwicklung der Supercomputer-Systeme in Jülich ist eng verknüpft mit dem Ausbau entsprechender Systeme in den beiden anderen deutschen Höchstleistungsrechenzentren sowie der Entwicklung beim Aufbau einer europäischen Supercomputer-Infrastruktur. Von höchster Bedeutung ist in diesem Zusammenhang die Entwicklung eines Geschäftsplans für das Gauss Centre for Supercomputing (GCS). Auch die Kooperation des GCS mit der in Gründung befindlichen Gauss-Allianz der mittelgroßen deutschen Supercomputer-Zentren ist von Bedeutung für das Supercomputing in Jülich. Auf europäischer Ebene sind die Kooperation PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) und das damit verbundene und vom JSC koordinierte Projekt PRACE von zentraler Bedeutung. Die in der PRACE-Kooperation getroffenen Absprachen und die im PRACE-Projekt erzielten Ergebnisse werden das europäische HPC-Ökosystem strukturieren und die Rollen der europäischen HPC-Zentren bestimmen.

Mittelfristiges Ziel ist, im Jahr 2009 im Forschungszentrum Jülich einen Petaflop-Computer zu installieren und Standort eines europäischen Supercomputer-Zentrums zu werden. Integraler Bestandteil der dazugehörigen Planungen ist die Weiterentwicklung des dualen Rechnerkonzepts. Dazu wurde gemäß dem im Jahr 2006 aufgestellten Zeitplan einerseits der General-Purpose Supercomputer JUMP im Sommer 2007 durch die Integration eines zentralen Datenservers JUST entlastet, andererseits im November 2007 der "leadership class" Supercomputer JUBL durch ein fünffach leistungsstärkeres IBM Blue Gene/P System JUGENE mit 65536 Prozessoren und einer Gesamtleistung von 223 TFlop/s ergänzt. Der weitere Ausbau des dualen Rechnerkomplexes soll in folgenden Schritten erfolgen:

- Frühjahr 2008  
Beschaffung und Installation eines Power6-basierten Systems zum reibungslosen Übergang von JUMP zu einem innovativen General-Purpose-Supercomputer, einem Cluster mit neuester Hardware-Technologie
- ab Mitte 2008  
Beschaffung und Aufbau des o. g. General-Purpose-Supercomputers mit etwa 200 TFlop/s als Nachfolge von JUMP in enger Kooperation mit europäischen Hardware- und Software-Herstellern; ggf. Ausbau auf 300 TFlop/s als Teil eines Rechensystems für die europäische Fusions-Community
- Ende 2008  
ggf. Leistungsverdopplung des IBM Blue Gene/P Systems

Eine ständige Aufgabe des Jülich Supercomputing Centre ist die Untersuchung neuartiger Rechnerarchitekturen im Hinblick auf ihre Einsetzbarkeit für zukünftige Höchstleistungsrechner. In der Klasse der Spezialprozessoren haben Cell-Prozessoren derzeit das größte Potential. Der Betrieb eines Clusters von IBM Cell-Prozessoren und die Etablierung einer Arbeitsgruppe bestehend aus Mitarbeitern des Herstellers und des JSC sowie aus Anwendern ermöglichen die Entwicklung und das Testen von Algorithmen für Cell-Prozessoren. Besondere Aufmerksamkeit gilt im Jahr 2008 den Cell-Prozessoren mit 64-Bit-Floating-Point-Architektur.

## Thema 2: Computational Science, Algorithmen und Architekturen

Die verschiedenen Komponenten der "Fast-Coulomb-Solver"-Bibliothek werden weiterhin für parallele Anwendungen realisiert. Die Basisalgorithmen werden auch für stark inhomogene sowie periodische Systeme erweitert. In Zusammenarbeit mit IFF-2 wird die Skalierbarkeit paralleler Multi-Particle-Collision-Dynamik untersucht und um verschiedene Randbedingungen sowie komplexe Moleküle erweitert. Ein neues Modell zur Behandlung von langsamen Magnetfeldern wird im Laserplasma-Code PEPC-B implementiert. In der Quantenchemie ist neben der Anpassung der Programmpakete an das JUGENE-System eine stärker anwendungsorientierte Komponente vorgesehen. Realistische Simulationen von Ionenfallen-Quantencomputern werden durchgeführt. Die Robustheit von fehlertoleranten Quantenfehlerkorrekturverfahren wird durch systematische Parameterstudien getestet. Im Bereich Biophysik wird die Untersuchung der Faltungsprozesse in Proteinen mit bis zu 100 Aminosäuren fortgesetzt. Es ist geplant, die Simulationssoftware SMMP komplett neu zu schreiben, um Ihren Einsatz auf neuen Rechnerarchitekturen wie Cell-Prozessoren zu ermöglichen. Im Bereich numerische Algorithmen wird in Zusammenarbeit mit dem IFF und der FH Aachen ein Verfahren zur optimalen Platzierung von Messpunkten für tomographische Verfahren entwickelt. Zur Durchführung realistischer Simulationen wird das gekoppelte

Modell für Wasserflüsse im Boden-Pflanze-System parallelisiert und es wird die Möglichkeit des Einsatzes von adaptiven Vernetzungstechniken untersucht. Nachdem in den letzten Jahren die experimentelle Datenbasis für die Fußgängerdynamik wesentlich verbessert wurde, steht nun die Entwicklung verfeinerter Modelle im Fokus. Im Bereich Brandsimulationen sollen neben den Aktivitäten hinsichtlich der Parallelisierung von FDS die Untersuchungen zum Konvergenzverhalten bei Nutzung von "Large Eddy Simulation" und hoher Gitterauflösung weitergeführt werden. Im Bereich Leistungsanalyse soll die bisherige Infrastruktur um die Analyse zeitabhängigen Verhaltens ergänzt werden. Außerdem sollen erste Arbeiten zur Unterstützung hybrider Anwendungen auf hochskalierbaren Systemen wie Blue Gene/P unternommen werden.

### **Thema 3: Grid Computing**

Die im JSC seit 1997 entwickelte Grid-Middleware UNICORE wird auch weiterhin an neue Standards des Grid-Computing und der Web Service Welt angepasst, Stabilität und Leistungsfähigkeit gemäß den Anforderungen aus dem Produktionsbetrieb im NIC, in D-Grid und DEISA verbessert sowie um neue Funktionalitäten weiterentwickelt. Dabei werden 2008 die Entwicklungen aus den EU-Projekten A-WARE, Chemomentum und OMII-Europe in die nächsten Versionen von UNICORE 6 integriert, z. B. die Unterstützung des OGSA-BES Standards, ein Interface zum SAML-basierten VOMS-Server zur Autorisierung von virtuellen Organisationen und zahlreiche Workflow-Komponenten. Weiterhin wird die Einbindung skalierender und robuster Daten-Management-Lösungen in UNICORE angestrebt, die auf Hochleistungsdatentransfer-Mechanismen und den in HPC-Umgebungen vorhandenen Datenspeicherlösungen basieren. Darüber hinaus steht bei der Entwicklung die Integration von Benutzeranforderungen und Anwendungen im Mittelpunkt. In allen deutschen und europäischen FE-Projekten werden die Arbeiten planmäßig fortgeführt.

---

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 4 Schlüsseltechnologien
- **4.2 Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen**
- 4.2.1 Nanoskalige Logik-Bauelemente und Quantenelektronik
- 4.2.2 Magnetoelektronik und Spintronik
- 4.2.3 Terahertz-Elektronik
- 4.2.4 Hysteretische oxidbasierte Speicherkonzepte 4.2.5 Molekular- und bioelektronische Hybrid-Systeme

**Beteiligte Institute:** [IBN](#), [IFF](#), [ZCH](#), [ZEL](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Rainer Waser, IFF, [r.waser@fz-juelich.de](mailto:r.waser@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
- 

## Highlights

### Neuartige nichtflüchtige Speicher

Die physikalischen Grenzen der vertikalen Skalierbarkeit ferroelektrischer Speicher wurden von Jülicher Forschern aus dem IFF mit Hilfe der höchstauflösenden HRTEM weiter aufgeklärt. Es ist ihnen gelungen, die geringfügige Verschiebung der Kationen aus den zentrosymmetrischen Positionen der Elementarzellen in ultradünnen, epitaktischen PZT-Schichten auf SrRuO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>-Substraten zu vermessen. Auf der Basis dieser Verschiebung ließ sich die lokale ferroelektrische Polarisation als Funktion des Abstandes von der PZT/SrRuO<sub>3</sub>-Grenzfläche darstellen. Die Ergebnisse belegen frühere theoretische Vorhersagen, wonach die Polarisierung im Abstand einiger Gitterkonstanten von der Grenzfläche unterdrückt wird. Dies zeigt offenbar einen grundlegenden Size-Effekt in nanoskaligen Ferroelektrika.

*C.L. Jia, V. Nagarajan, J.Q. He, L. Houben, T. Zhao, R. Ramesh, K. Urban and R. Waser, Nature Materials 6, 64 (2007)*

### Spintronik

Im Forschungszentrum Jülich konnten neue Verfahren zum Schalten von spintronischen Bauelementen durch direkte spinpolarisierte Ströme erreicht werden. Die Forschungen in Jülich im IFF zum Mechanismus des Spin-Transfers (STT) haben erstmals erlaubt, den Einfluß der magnetokristallinen Anisotropie auf das Schaltverhalten zu studieren und einen zweistufigen Schaltprozess in Nanokontakten von nur 70 nm Durchmesser zu realisieren. Dieser Fortschritt wurde ermöglicht durch eine enge Zusammenarbeit zwischen Experiment und mikromagnetischer Simulation, die nun das Wirken spinpolarisierter Ströme auf die Magnetisierung voll berücksichtigen kann. Daraus resultiert ein bislang einzigartiges Detailverständnis der während des Schaltvorgangs ablaufenden mikroskopischen Prozesse. Damit sind jetzt auch umfangreiche Vorhersagen zu anderen Kontaktgeometrien und magnetischen Grundzuständen möglich. Durch dieses

enge Zusammenwirken von Experiment und Simulation wurde auf diesem Gebiet eine international führende Stellung erreicht. Die aktuellen und zukünftigen Arbeiten werden es ermöglichen, die magnetischen Umschaltvorgänge effizienter zu gestalten und besser kontrollieren zu können, und liefern damit einen wichtigen Beitrag zu Schnelligkeit, Zuverlässigkeit, und Energieeffizienz zukünftiger spintronischer Bauelementkonzepte. Die Forschung und weitere Entwicklung der Spintronik auf der Nanometer-Skala zeigt zudem grundlegende Konzepte für die Quanteninformation auf.

*Y. Liu, S. Gliga, R. Hertel, and C.M. Schneider, Appl. Phys. Lett. 91 (2007) 112501 - ausgesucht für Virt. J. Nanoscale Sci. Techn. 16(13) (2007)*

## **Verspanntes Silizium für die Nanoelektronik**

Durch die Erfindung des JÜLICHER Verfahrens im IBN konnte verspanntes Si auf 200mm-Wafer übertragen und damit bei AMD-Transistoren hergestellt werden. Der Ausgangsstrom konnte dadurch um bis zu 85% für Langkanaltransistoren und 15% für Kurzkanaltransistoren erzielt werden. Das Medea+ Projekt SILONIS wurde mit dem Jean Leblanc Award der Europäischen Kommission ausgezeichnet (s.u.). Projektpartner sind AMD, Aixtron, Siltronic, MPI Halle, STM, Soitec, Leti Im Rahmen dieses Medea Projektes DECISIF - "Device and circuit performance boosted through silicon material fabrication" wird das JÜLICHER Verfahren zur Herstellung von verspanntem Si von den Fa. Soitec und Siltronic erstmals für 300mm-Wafer erprobt und mit Soitec Wafern verglichen werden. Es werden damit Transistoren mit hochverspannten Si und Ge Nanostrukturen mit high-k-Dielektrika für die 22nm-Generation hergestellt. Die vorhandenen Epitaxieanlagen und Prozessieranlagen werden im Rahmen des Projektes auf die 300mm-Wafer umgestellt. Neben dem CNT Dresden entsteht somit eine 300mm-Wafer-Forschungsplattform am Forschungszentrum Jülich, die in der Lage sein wird, high-k-Dielektrika, leitende Nitride und SiGe industriekompatibel abzuscheiden. Die beteiligten Industriefirmen und Partner sind AMD, Aixtron, Siltronic, STM, Soitec, Leti, MPI Halle.

## **Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich**

Die Fähigkeit Daten mit hohen Raten zu erfassen, zu verarbeiten und zu übertragen ist der Schlüssel zu den Fortschritten in allen Feldern einer modernen Gesellschaft. Die Werkzeuge dieser Schlüsseltechnologie sind die Mikrochips. Sie sind Grundlage aller intelligenten Produkte und ihr Siegeszug in Form von neuen Funktionen und neuen Produktanwendungen wird sich weiter fortsetzen. Die beständige Miniaturisierung in Verbindung mit einer permanenten Leistungssteigerung werden weitere Anwendungsfelder eröffnen, die fern der heutigen Vorstellungen liegen. Was bisher als Mikrotechnologie bekannt war, wurde zur Nanoelektronik seit im Jahre 2003 die Halbleiterschaltungen den 90nm-Technologieknoten erreichten und sich zum heutigen Zeitpunkt dem 32nm-Knoten nähern.

Das Programm "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen" (ITnano) ist entlang der wissenschaftlichen Herausforderungen, die durch die ultimative Miniaturisierung in der Nanoelektronik entstehen, ausgerichtet. Der Kern wird bestimmt durch die Fragen, wohin uns die ultimative Miniaturisierung bringen wird und was sie beschränken wird. Welche Techniken können erarbeitet und angeboten werden, um die derzeit bekannten physikalischen Grenzen zu erreichen und - durch völlig neuartige Ansätze - zu überschreiten? Welche Paradigmenwechsel kann es geben und welche neuen Konzepte lassen sich finden?

Diese Erkenntnisse können in immer geringerem Maße durch einzelne Arbeitsgruppen erzielt werden, da sie hochgradig themenübergreifend und interdisziplinär sind. Aus diesem Grund und zur Erweiterung der wissenschaftlichen Basis hat sich das Programm im Rahmen der Jülich Aachen Research Alliance (JARA) mit 10 Instituten der RWTH aus den Bereichen Chemie, Physik, Elektrotechnik und Maschinenbau zu der Sektion "Fundamentals of Future Information Technology" (JARA-FIT) zusammengeschlossen. Die strategischen Zielsetzungen des Programms bleiben erhalten, gewinnen jedoch durch die Erweiterung eine breitere Grundlage und eröffnen neue Anwendungsfelder.

Das Programm besitzt einen hohen Vernetzungsgrad und ist ein essentieller Baustein des Forschungsbereichs Schlüsseltechnologie.

Ausführliche Informationen zur wissenschaftlichen Arbeit des Programms stellt der CNI Annual Report 07 unter <http://www.cni-juelich.de/publications> bereit.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### Thema 1 - Nanoskalige Logik-Bauelemente und Quantenelektronik

verantwortlich: D. Grützmacher

Die fortschreitende Entwicklung in der CMOS-Technologie, ist die treibende Kraft der modernen Halbleitertechnologie. Daher wird in enger Zusammenarbeit mit der Industrie die Entwicklung von fortgeschrittener CMOS-Technologie weiter vorangetrieben, um die physikalischen Grenzen auszuloten. Insbesondere die Weiterentwicklung des Konzeptes von Transistoren mit verspannten Siliziumkanälen und angepassten dielektrischen und metallischen Filmen für den Aufbau der Transistorbasis ist im Fokus des Interesses. Der Ausbau des "Jülicher Prozesses" für die Anfertigung von dünnen verspannten Si-Filmen auf isolierenden Substraten (strained Si on insulator sSOI) verspricht eine Verbesserung der Transistoreigenschaften aufgrund von hohen Ladungsträgerbeweglichkeiten. Erste Bauelemente, in Zusammenarbeit mit AMD erstellt, zeigen eine bis zu 80% verbesserte Charakteristik. Um die Elektrostatik der Transistoren zu optimieren, sind erste Ansätze für Transistoren mit einer doppel- oder vielseitigen Basis unternommen worden. Diese Bauelementarchitekturen ermöglichen eine weitere Reduktion der Dimensionen. Insbesondere 1-dimensionale Si-Quantendrähte mit einer umhüllenden Basisstruktur sind vielversprechend. Uniaxiale Verspannung des Si-Drahtes sollte nach theoretischen Voraussagen zu einer erhöhten Beweglichkeit für Elektronen und Löcher führen und somit logische Schaltkreise, aufgebaut aus p- und n-Kanal-Transistoren, weiter verbessern. Die bisher gewonnen Erkenntnisse der Si-Nanotechnologie für den Einsatz in der CMOS-Technologie unter Berücksichtigung industrieller Produktionsverfahren sind Grundvoraussetzung für das weitere erfolgreiche Umsetzen von neuen Ideen und Einsetzen neuartiger Materialkombinationen in die bestehende Si-Technologie.

Integraler Bestandteil für die Forschung auf diesem Gebiet ist die sorgfältige Materialanalyse und die Möglichkeit zur Bauelementherstellung. So sind die Reinraumnutzung und der einfache Zugriff auf eine große Zahl von Analysegeräten unabdingbar mit dem Erfolg verknüpft. Insbesondere die Ionenstrahltechnologie mit ihren Methoden zur Charakterisierung verspannter Si-Nanostrukturen ist hier hervorzuheben. Diese Möglichkeiten erleichtern erheblich die für die Zukunft geplanten Aktivitäten zur Integration von verspannten Si- und Ge-Heterostrukturen, neuen dielektrischen Materialien und Gate-Metallen.

Die Wärmeerzeugung in höchstintegrierten Schaltkreisen bleibt eines der Schlüsselprobleme, das in naher Zukunft gelöst werden muss. Dazu erscheint es notwendig, den Energieverbrauch pro Schaltvorgang dramatisch zu reduzieren. Hier sind Lösungsansätze gefordert, die weit über die heutige standardmäßig eingesetzte CMOS-Technologie hinausgehen. Als mögliche ultimative Lösung bieten sich das Quantumcomputing an, welches neben ganz anderen Bauelementkonzepten auch einen grundsätzlich anderen Rechenalgorithmus verlangt. Dieser ermöglicht es, mit einer vergleichsweise geringen Integrationsdichte heutige Superrechner in den Schatten zu stellen. Bis es einmal so weit sein sollte, ist noch eine Vielzahl von grundsätzlichen Problemen zu lösen, die sich mit der kontrollierten Erzeugung, Manipulation und Auslesung von Quantenzuständen befassen. Eine Möglichkeit ist das Studium von Quantenzuständen in Halbleiternanodrähten. In den derzeitigen Arbeiten wird die Herstellung von Quantendrähten in den Materialsystemen GaAs/In(Ga)As und GaN/InN untersucht. Das Ziel der Manipulation von einzelnen Quantenzuständen, d.h. von Elektronen und ihrer Spinwellen, erfordert ein Höchstmaß an Perfektion dieser Strukturen. Derzeit werden Halbleiterquantendrähte mit einem selbstorganisierenden Prozess epitaktisch hergestellt, oder mittels Ätzverfahren aus 2-dimensionalen Schichtsystemen herausgeätzt. Kontrolliertes Wachstum von Quantendrähten wurde mit der Molekularstrahlepitaxie (MBE) sowie mit der metallorganischen Gasphasenepitaxie (MOVPE) erreicht. Hier haben wir uns auf Methoden spezialisiert, die das Wachstum der Drähte ohne einen auf die Oberfläche gebrachten Katalysator erlauben, um störende Kontaminationen der Halbleiternanodrähte zu vermeiden. Vielversprechende Resultate zum selektiven Wachstum von GaAs-Drähten mittels MOVPE, sowie von GaN/InN-Drähten auf Silizium-Substraten mittels MBE konnten erzielt werden. Letzteres erscheint von Interesse insbesondere für die Integration von optischen Bauelementen auf Silizium, z. B.

Einzelphotonenemitter für die Quantenkryptographie. Um diese Aktivitäten weiter auszubauen, wurde eine MBE Anlage neu aufbereitet, die derzeit mit Quellen für das Wachstum von Ga-In-As-Sb ausgestattet wird. InSb-Nanostrukturen sind als Modellsystem geeignet, da die geringe effektive Elektronenmasse und große Banddiskontinuitäten zu einer ausgeprägten Quantisierung bereits in relativ großen Nanostrukturen führen, die technologisch leichter handhabbar erscheinen.

Um die Probleme des unkorrelierten Wachstums von Nanostrukturen auf Oberflächen zu beherrschen, wurden verschiedene Wege untersucht, durch topografische und chemische Modifikationen der Oberfläche die Nukleation von Nanostrukturen zu steuern. Mit diesem Ansatz der gesteuerten Selbstorganisation gelang es, Ge-Inseln auf topologisch modifizierten Si-Substraten in 2-dimensionalen Perioden präzise auf der Oberfläche anzuordnen. Dies gelang ebenfalls für GaAs-Drähte auf mit SiO<sub>2</sub> chemisch strukturierten GaAs-Substraten. Erste Versuche mit GaN-Drähten auf Si-Oberflächen sind viel versprechend. Die exakte Positionierung von Quantenstrukturen auf der Oberfläche ist von großer technologischer Relevanz, um gezielt einzelne Nanostrukturen zu adressieren und für Bauelemente zu verwerten. Sie erlaubt aber auch die Herstellung ganz neuer künstlicher Materialien, wie Quantenpunktübergitter, deren physikalische Eigenschaften noch zu erforschen sind. Die wissenschaftlichen Aktivitäten haben zum Ziel, die Grenzbereiche der Halbleiternanotechnologie zu erkunden, neue physikalische Eigenschaften zu entdecken und in Bauelemente umzusetzen, die auf neuen Prinzipien fußen und eine größere Funktionalität versprechen.

## **Thema 2 - Magnetoelektronik und Spintronik**

verantwortlich: C.M. Schneider

Spinabhängige Phänomene bieten viele neue Perspektiven in der Informationstechnologie. Dieses Potential spannt zwar den Bogen von zusätzlichen Spinfunktionalitäten in der heutigen Mikroelektronik bis hin zu vollständig neuen Bauelementen, ist aber bisher nur zu einem kleinen Teil genutzt. Die Spinelektronik kann sogar den Einstieg in die Quanteninformation auf Festkörperbasis ermöglichen. Unsere theoretischen und experimentellen Arbeiten erforschen grundlegende Aspekte von Spintransferprozessen, um mit diesem Wissen Strategien zu ihrer Nutzbarmachung zu entwickeln. Gegenwärtig verfolgen wir drei Linien:

- Neue magnetische Materialsysteme
- Verständnis und Kontrolle spinabhängiger Transportprozesse
- Effiziente magnetischer Schaltprozesse

Die Synthese neuer Materialsysteme ist ein zentraler Aspekt der Spinelektronik. Im Zusammenhang mit Magnesiumoxid-basierten magnetischen Tunnelkontakten rücken neuerdings bcc-Phasen von Kobalt und CoFe-Legierungen ins Zentrum des Interesses. Hier sagt unsere theoretische Behandlung hohe Curie-Temperaturen voraus - eine Voraussetzung für hohe Spintransporteffekte bei Raumtemperatur. Weitere Aktivitäten konzentrierten sich auf Wismut als Element mit hoher Spin-Bahnwechselwirkung und partiell halbmetallischem Charakter, das potentiell für die Spinelektronik nutzbar ist. Quantenzustände, die sich an Oberflächen und Kanten von Bi-Schichten ausbilden, können eine Spin-Hall-Phase stabilisieren. Magnetische Halbleiter versprechen eine simultane Kontrolle von Ladung und Spin und eine effiziente Spininjektion in GaAs oder Si. Die Fortsetzung unserer Arbeiten zu Cr-dotiertem GaN zeigte einen klaren Einfluss der strukturellen Perfektion auf die magnetischen Eigenschaften. Damit gelingt es, die magnetische Ordnungstemperatur auf den bisher höchsten berichteten Wert von ca. 620 K für GaN-basierte verdünnte magnetische Halbleiter zu steigern.

Ein alternativer Zugang zu einer effizienten Spininjektion erfordert hoch spinpolarisierte Elektroden. Unsere Forschungen konzentrierten sich dabei auf dünne Schichten der Heuslerphase Co<sub>2</sub>Cr<sub>0.6</sub>Fe<sub>0.4</sub>Al (CCFA), die mit Magnesiumoxid-Tunnelbarrieren kombiniert wurden. Wir beobachten einen hohen negativen Tunnelmagnetowiderstand (TMR) von mehr als -60% in texturierten CCFA/MgO/CoFe-Tunnelkontakten, der insbesondere bei Biasspannungen von ca. 600 mV auftritt. Diese Eigenschaft wird auf die elektronische Struktur des CCFA zurückgeführt und hat darüber hinaus eine relativ geringe Temperaturabhängigkeit des TMR zur Folge. Tunnelkontakte stellen eine Basisstruktur für die Spinelektronik dar und erlauben auch Experimente mit supraleitenden Elektroden. Josephson-Kontakte mit ferromagnetischen Barrieren weisen einen interessanten Weg zu einer supraleitenden Spinelektronik-Variante, bei der sehr lokal magnetische Eigenschaften kontrolliert werden können.

Eine wichtige Facette in der Spinelektronik - speziell im Hinblick auf Quanteninformationsverarbeitung - sind Quantentransporteffekte, die in nanoskaligen Strukturen auftreten und sowohl Ladungs- als auch Spinabhängigkeiten aufweisen. Quantenpunkte könnten eine wichtige Rolle bei der ballistischen

Spininjektion in Halbleitern, wenn es gelingt, eine ausreichende Zeeman-Aufspaltung der elektronischen Zustände im Quantenpunkt zu realisieren. In GaInAs/InP-Split-Gate-Quantenpunkt-Kontakten können wir aufgrund eines großen g-Faktors brauchbare Zeeman-Aufspaltungen nachweisen. Quantenpunkte werden auch als eine mögliche Realisierung von Quantenbits (Qbit) diskutiert. Theoretische Untersuchungen der Spinkohärenz in Quantendots mit benachbarten Gateelektroden, zeigen allerdings, dass die Dephasierung der Spins mit abnehmender Größe des Quantendots stark zunimmt. Damit werden der Miniaturisierung dieses Konzepts Grenzen gesetzt. Eine spezielle Form "polarisierter" Quantendots wird durch Einzelmolekül-Magnete (SMM) repräsentiert. Unsere Arbeiten zeigen, dass der kohärente Quantentransport durch SMMs durch ein charakteristisches Wechselspiel zweier Effekte bestimmt wird: das intrinsische kohärente Tunneln der Magnetisierung auf dem Molekül und die Kondo-Spinabschirmung durch die Austauschkopplung mit den Elektroden. Dies eröffnet einen Weg, die magnetische Orientierung des SMM durch eine direkte Magnetotransportmessung zu bestimmen.

Auf dem Gebiet der magnetischen Schaltprozesse haben wir primär den Mechanismus des Spin-Transfers (STT) weiter erforscht. Unsere Arbeiten an einkristallinen Nanostrukturen von 70 nm Durchmesser zeigen erstmals einen klaren Einfluss der magnetokristallinen Anisotropie auf das Schaltverhalten, das einem Zweistufen-Verlauf folgt. Als Konsequenz folgt eine asymmetrische Winkelabhängigkeit der kritischen Stromdichte, die auch in begleitenden mikromagnetischen Simulationen bestätigt wird. Die Simulationen behandeln auch das strominduzierte Schalten magnetischer Vortexkerne. Dabei konnten wir zeigen, dass auch bei einer Anregung durch spinpolarisierte Ströme der Schaltprozess eine Abfolge universeller Vortex-Antivortex Generations- und Annihilationsschritte durchläuft.

### **Topic 3 - Terahertz Elektronik**

Verantwortlich: N. Klein

Im Jahre 2007 wurden die Zielsetzung, neue Materialsysteme, Bauelemente und Methoden für elektromagnetische Sensor-Anwendungen zu entwickeln, weiter erfolgreich fortgesetzt. Zusätzlich haben wir damit begonnen, neue Sensor-Techniken mit Anwendungspotenzial für die Sicherheitstechnik zu entwickeln. Obwohl die Ausgangzielsetzung diese Topics der Bereich des elektromagnetischen Spektrums zwischen Frequenzen von 100 GHz und einigen Terahertz war, haben wir weiterhin attraktive neue elektromagnetische Sensorkonzepte bei niedrigeren Frequenzen untersucht, insbesondere im Mikrowellenbereich.

Innerhalb des Topics wurde ein Verfahren zur Identifikation von Flüssigkeiten in geschlossenen Kanistern und Flaschen entwickelt (MLI = Microwave Liquid Identification). Motiviert durch die versuchten Terroranschläge mit flüssigen Sprengstoff in London im Sommer 2006 und die sich daraus ergebenden Einschränkungen für die Mitnahme von Flüssigkeiten im Handgepäck von Flugpassagieren, wurde ein erster Prototyp für ein Flaschenkontrollgerät entwickelt und auf der Hannovermesse 2007 der Öffentlichkeit präsentiert. Im September 2007 wurde das Spin-Off-Unternehmen EMISENS GmbH gegründet. Das Ausgründungsprojekt erhielt den ersten Platz beim regionalen Gründerwettbewerb der Region Aachen (AC-Quadrat). Ein fortgeschrittener Prototyp eines Flaschenkontrollgerätes wurde in einem regulären Passagiercheckpoint am internationalen Flughafen in Prag erfolgreich einem Dauertest unterzogen. Basierend auf diesem Erfolg werden Mikrowellen-Nahfeldsensoren und abbildende Systeme im Rahmen der verbleibenden zwei Jahre des Programms im Hinblick auf medizinische, biologische, und Sicherheits-Anwendungen entwickelt. Kombinierte Sensoransätze basierend auf Mikrowellen-Nahfeldmethoden und offenen NMR-Systemen sind in Planung.

Durch die intrinsischen Quanteneigenschaften besitzen Supraleiter ein sehr spezifisches Potenzial für neuartige Terahertz-Bauelemente. Während des Jahres 2007 wurde ein wichtiger Durchbruch bei der Realisierung integrierter Schaltungen auf der Basis hochtemperatur-supraleitender Josephson-Kontakte erzielt. Bei hochintegrierten Arrays aus bis zu 620 Kontakten konnte die vollständige Synchronisation durch quasi-optische kohärente Sub-Terahertzstrahlung erzielt werden. Dieses Resultat ist von großer Bedeutung für zukünftige durchstimmbare Terahertz-Quellen und praktische Quanten-Spannungsstandards. Darüber hinaus wurden einzelne hochtemperatur-supraleitende Josephson-Kontakte für die Phononenspektroskopie genutzt. Dies zeigt den praktischen Nutzen der Hilbertspektroskopie in Richtung "Chipbasierte-Terahertz-Spektroskopie" auf. Weiterhin konnte gezeigt werden, dass künstliche Nanodots in supraleitenden Schichten zu einer gerichteten Bewegung von Vortices führen. Daraus ergeben sich interessante Perspektiven für neuartige nichtlineare Mikrowellenbauelemente.

AlN/GaN-Heterostrukturen besitzen ein hohes Potenzial für Mikrowellen- und Terahertz-Bauelemente. Fundamentale Studien an resonanten Tunnelstrukturen haben dazu beigetragen, den Mechanismus der Stromgenerierung aufzuklären. Es zeigt sich eine erhöhte ultraschnelle Photoleitfähigkeit in AlGaN/GaN bei

hohen elektrischen Feldstärken. Die Ergebnisse sind für Pikosekunden-Schalter in zukünftigen drahtlosen Kommunikationssystemen von Bedeutung.

AlN/Au-Multilag und freistehende Strukturen wurden im Hinblick auf die Realisierung mikro- und nanomechanischer Resonatoren für Biosensor-Anwendungen entwickelt. Die Aktivitäten bezüglich ferroelektrischer Schichten für Terahertz-Anwendungen, die 2006 begonnen wurden, haben zu systematischen Untersuchungen der mechanischen Spannungsabhängigkeit der ferroelektrischen Eigenschaften dünner Schichten und Heterostrukturen geführt.

Neben Mikrowellen- und Terahertz-Sensorik wurden auch die elektromagnetischen Sensortechniken für niedrigere Frequenzen weiter entwickelt. Die Hochtemperatursupraleiter- SQUIDs konnten durch den Einsatz dicker epitaktischer Schichten bis zu 5 Mikrometer Schichtdicke weiter verbessert werden. Hochtemperatursupraleiter-SQUIDs wurden als hochempfindliche AC-Sensoren für niederfrequente NMR (Kernspinresonanz) - Messungen zur Flüssigkeitsidentifikation eingesetzt.

Der Schwerpunkt von Topic 3 hat sich im Jahr 2007 von dem Thema "Terahertz Elektronik" in Richtung "Elektromagnetischer Sensorik" geändert. Neben den biomedizinischen Sensoranwendungen bieten die erforschten Sensortechniken auch ein großes Potenzial für die Sicherheitstechnik, insbesondere für drängende Fragen der Flughafensicherheit. Niederfeld-NMR, Mikrowellen- und Terahertz-Sensorik und Kombinationen daraus sind einer der größten Herausforderungen für den verbleibenden Verlauf des Programms.

#### **Thema 4: Hysteretische oxidbasierte Speicherkonzepte**

Verantwortlich: R. Waser

Die große Herausforderung auf dem Gebiet der Random Access Memories (RAM) ist die Erforschung und Entwicklung von Konzepten für neuartige, nicht-flüchtige Zelltypen, um die Vorteile der heutigen Speicherklassen zu vereinen, d. h. den geringen Energieverbrauch und den schnellen Schreibzugriff flüchtiger DRAM- und SRAM-Typen auf der einen Seite sowie die nichtflüchtige Informationsspeicherung in Flash und Festplatten auf der anderen Seite. Die Kombination dieser Vorteile hat das Potential, zu einer neuen Revolution in der mobilen Informationstechnik und zu ganz neuen Anwendungsfeldern zu führen. Unsere Forschung ist auf einige der vielversprechendsten Konzepte unter Nutzung von Oxiden und höheren Chalkogeniden fokussiert. Diese Materialklassen weisen attraktive hysteretische Eigenschaften wie z. B. die ferroelektrische Polarisation oder ein resistives Schaltverhalten auf, die in nichtflüchtigen RAM genutzt werden könnten.

Im Bereich der ferroelektrischen Speicher (FeRAM) werden im vorliegenden Topic sowohl grundlegende Fragen als auch technologische Aspekte der vertikalen und lateralen Skalierbarkeit behandelt. Im letztgenannten Punkt haben wir unsere Arbeiten der Vorjahre in Richtung auf eingebettete Bleititanat-Nanoinseln in Niedrig-k-Matrizen aus HSQ (hydrogen silsesquioxane) erweitert. Nach einem chemisch-mechanisch Polierschritt konnten wir einen hochgradig ausgeprägten Kontrast mittels piezoelektrischer AFM aufnehmen. Die physikalischen Grenzen der vertikalen Skalierbarkeit wurden von uns mit Hilfe der höchstauflösenden HRTEM weiter aufgeklärt. Es ist uns gelungen, die geringfügige Verschiebung der Kationen aus den zentrosymmetrischen Positionen der Elementarzellen in ultradünnen, epitaktischen PZT-Schichten auf SrRuO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub>-Substraten aufzunehmen. Auf der Basis dieser Verschiebung ließ sich die lokale ferroelektrische Polarisation als Funktion des Abstandes von der PZT/SrRuO<sub>3</sub>-Grenzfläche darstellen. Die Ergebnisse belegen frühere theoretische Vorhersagen, wonach die Polarisation im Abstand einiger Gitterkonstanten von der Grenzfläche generell unterdrückt wird. Dies zeigt offenbar einen grundlegenden Größeneffekt in nanoskaligen Ferroelektrika.

Für künftige FeRAM-Generationen sind 3-D-Strukturen der ferroelektrischen Kondensatoren unabdingbar. Sowohl die Stöchiometrie als auch die Schichtdicke müssen in den konform abgeschiedenen Schichten außerordentlich homogen sein. Es ist uns gelungen, einen ALD-Prozess (ALD = Atomic Layer Deposition) für PZT-Filme auf der Basis gepulster Injektion von flüssigen Prekursoren zu entwickeln. Wir haben Prozessrouten erarbeitet, mit denen die Abscheidung von amorphen Schichten mit bisher unerreichter Homogenität bzgl. der Dicke und der Zusammensetzung ermöglicht wird. Dies macht unseren ALD-Prozess zu einem aussichtsreichen Verfahren zur Herstellung von ultradichten FeRAM-Chips.

Während unserer Studien zu den Mechanismen des ferroelektrischen Tunnelschaltens konnten wir ein neues, multifunktionales Phänomen aufdecken. Wir beobachteten in SrRuO<sub>3</sub>/PbZr<sub>0.2</sub>Ti<sub>0.8</sub>O<sub>3</sub>/Pt Dünnschichtkondensatoren sowohl ferroelektrische Polarisationsumkehr als auch resistives Schalten, indem

wir mit Hilfe eines PFM die senkrechte Piezoantwort sowie simultan die kapazitiven und Ohmschen Ströme aufgezeichnet haben. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass die Aufnahme von I-V-Kurven allein nicht ausreichen, um Schaltmechanismen zu klären. Künftige Studien werden zeigen, ob und wie dieser neue multifunktionale Schalteffekt ausgenutzt werden kann.

In den vergangenen Jahren konnte bei zahlreichen binären und ternären Übergangsmetalloxiden durch einen elektrischen Formierungsprozess ein Zustand eingestellt werden, der ein resistives Schalten zwischen zwei Widerstandswerten mittels kurzer Strompulse ermöglicht. Unsere Ergebnisse zeigen, dass der Effekt offenbar auf einer Ionen-Transport und einem Valenzwechsel im Kationen-Untergitter beruht, welche zu einem lokalen Metal-Isolator-Übergang führen. Messungen mittels C-AFM zeigen am Beispiel undotierter SrTiO<sub>3</sub>-Einkristalle, dass offenbar die Austrittsorte von Versetzungen mit einem Durchmesser von nur 1 bis 2 nm die eigentlich schaltenden Bereiche sind. Dies belegt das Potential des Effektes, welcher - im Prinzip - zu Speicherdichten bis in den Terabit-Bereich führen kann. Im Jahr 2007 konnten wir den Effekt in 10 nm dicken, epitaktischen SrTiO<sub>3</sub>-Dünnschichten bestätigen und haben unsere Untersuchungen auf akzeptor- und donator-dotierte Titanate ausgedehnt.

In ähnlicher Weise beruhen elektrochemische Metallisierungszellen auf der Oxidation einer aktiven Elektrode (z. B. Ag) und der Kationenmigration zu einer inerten Elektrode (z. B. Pt). Die beiden nicht-flüchtigen Speicherzustände sind definiert durch den Widerstand der Zelle nach Bildung bzw. Auflösung eines Metallfilaments durch den Festelektrolyten. Wir arbeiten u. a. mit Ag-Ge-Se als Festelektrolytsystem, da dieses für die Speicherzellen besonders geeignet zu sein scheint. Im Jahre 2007 ist es uns durch Einführung einer zusätzlichen, sehr dünnen GeO<sub>2</sub>-Schicht gelungen, den Schreibstrom auf 10 pA zu reduzieren - vier Größenordnungen unter den niedrigsten, bisher in der Literatur berichteten Wert. Damit konnte gezeigt werden, dass sich diese Speicherzellen nicht nur durch hohe Zyklenzahlen und ein großes Skalierungspotential auszeichnen, sondern auch eine große Energieeffizienz ermöglichen.

## **Thema 5: Molekular- und bioelektronische Hybrid-Systeme**

Verantwortlich: A. Offenhäusser

Ein Ansatz für die Erweiterung heutiger Technologien beinhaltet die Integrierung von Biomolekülen und maßgeschneiderten organischen Molekülen in konzeptionelle, elektronische Schaltkreise. Dabei ist der Transport von Ladungen in den Molekülen und den Molekül/Elektronik-Kontakten von maßgeblicher Bedeutung. Detaillierte Struktur- als auch Ladungstransport-Untersuchungen von unterschiedlichen organischen Molekülen, die sich potentiell als Isolatoren, Leiterelemente oder elektronische Schalter eignen, wurden sowohl an Monolagen als auch an Einzelmolekülen im UHV und an der Fest/flüssig-Grenzfläche durchgeführt.

Um die physikalischen Phänomene des Ladungstransportes in Alkylketten, p-konjugierten Fullerenen, Metallredoxkomplexen, organischen Halbleitern und Redoxproteinen zu untersuchen, wurden modernste Untersuchungsmethoden angewendet und neue Ansätze entwickelt. Die neuartigen molekularen Schaltungen, die mehrheitlich auf vertikalen STM-Konfigurationen beruhen, sollen schaltende, gleichrichtende und Speicher-Funktionen ermöglichen, die durch externe elektrische, elektrochemische oder mechanische Größen gesteuert werden können. Mit Hilfe der eingesetzten Untersuchungsmethoden konnten Aussagen zum Selbstorganisationsverhalten funktionaler Moleküle gewonnen und einzelne Moleküle lokal angesprochen, manipuliert und auch elektrisch charakterisiert werden. Darüber hinaus wurde ein Konzept zum mechanisch kontrollierten Molekulartransistor realisiert, bei dem der Ladungstransfer als Funktion der Kontaktwechselwirkung zwischen Molekül und Elektrode gemessen wurde. In mehreren Untersuchungen konnte für verschiedene Moleküle gezeigt werden, dass die elektrischen Eigenschaften des molekularen Hybridsystems nicht nur von der elektronischen Struktur des Moleküls sondern auch maßgeblich von der jeweiligen Kontaktgeometrie auf atomarer Skala abhängen. Die Auswertung der experimentellen Untersuchungen wurde durch detaillierte Berechnungen der Ladungstransporteigenschaften von Molekülen und der Selbstorganisation molekularer Schichten unterstützt. Basierend auf diesen quantenchemischen und quantenphysikalischen Berechnungen wurden Modelle entwickelt, die den Zusammenhang zwischen elektrischen Signalen und Molekül/Kontaktstruktur herstellen. Darüber hinaus wurden funktionale Einzelmoleküle oder Molekülgruppen in eine isolierende Matrix realisiert. Die erhaltenen Nanostrukturen funktionaler Molekülgruppen zeigen ein hochinteressantes Potential zur Strukturierung von kleinen, periodischen Oberflächenmustern mit präziser Abstandskontrolle durch molekulare Abstandshalter.

Ein anderer Ansatz für die Erweiterung heutiger Technologien beinhaltet die Untersuchung evolutionär optimierter biologischer Systeme als Konzepte für zukünftige Informationsverarbeitungssysteme. Unsere Aktivitäten zielen darauf, die funktionale Kopplung von biologischer Signalverarbeitung und Erkennungselementen mit mikroelektronischen und nanoelektronischen Halbleiterbauteilen und -

schaltungen zu analysieren und zu nutzen. Für die elektronische Kopplung zwischen neuronaler Signalverarbeitung und mikroelektronischen Bauteilen wurde ein wichtiger Schritt hin zu einer Multikanal-Kommunikation zwischen Nervenzellen und einem hoch integrierten Siliziumchip geleistet. Dazu wurde ein CMOS-Schaltkreis entwickelt, der 4.096 individuell adressierbare Pixel in einer 32×32-Matrix mit einem Mittenabstand von nur 12,5 µm bereitstellt. Jedes einzelne Pixel auf dem Chip kann dabei sowohl Signale an Zellen, die typische Zelldurchmesser von ca. 10-20 µm besitzen, übertragen, als auch die Signale der Zellen auslesen. Dies erlaubt uns in Zukunft, jede beliebige Nervenzelle in einem Netzwerk zu adressieren und Signale zwischen biologischen und elektronischen Systemen auszutauschen. Um Messungen an Zellen zu ermöglichen und um eine hohe Eingangskapazität der Sensoren zu erreichen, wurde die Chipoberfläche mittels Atomic Layer Deposition mit einer dünnen Schicht aus Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/HfO<sub>2</sub> beschichtet. Die Biokompatibilität dieser Bauelemente konnten erfolgreich nachgewiesen werden, und erste elektronische Funktionstests der Chips im flüssigen Medium waren ebenfalls erfolgreich. Für die Herstellung von Netzwerken aus Nervenzellen werden Zelladhäsionsmoleküle eingesetzt, die sowohl Zelladhäsion als auch das Auswachsen der Zellfortsätze bestimmt. Darüber hinaus untersuchen wir deren Fähigkeit, die Polarität von Neuronen zu kontrollieren, was wichtig für die Herstellung von definierten Schaltkreisen ist. Es ist uns nun gelungen, durch Nano- und Mikrostrukturierung die Polarität der Nervenzellen vorzugeben.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

#### **HGF-Projekt "Virtuelles Zentrum für die Elektronenstrahlithographie"**

Im HGF-Projekt "Virtuelles Zentrum für die Elektronenstrahlithographie" verfolgen das Forschungszentrum Karlsruhe und das Forschungszentrum Jülich das Ziel, durch Bündelung und Vernetzung von Forschungsaktivitäten sowie Austausch von Technologiedaten die führende Rolle bei der Anwendung von Elektronenstrahlithographie in der Nanotechnologie in Deutschland zu übernehmen. Ziel ist die Verbesserung der Lithographieprozesse (Overlay-Genauigkeit) für die Herstellung von Transistoren mit Nanometer-Abmessungen. Die Verbesserung der Genauigkeiten unter Prozessbedingungen wurde quantifiziert. Dabei wurde eine prozessabhängige systematische Verschiebung von 10 - 20 nm festgestellt, die jedoch kompensiert werden kann. Die Streuung liegt bei  $s < 10$  nm. Spezielle Verfahren zum direkten Schreiben von Markern (sowohl beim Direktschreiben als auch beim Erstellen der Fotolithographiemaske) ohne mechanische Ortsänderung in einem Schreibfeld wurden entwickelt. Die Firma AMD profitiert bereits von den verbesserten Verfahren und nutzt die Möglichkeit, hochverspannte Nanostrukturen mit dem Elektronenstrahlschreiber realisieren zu können.

#### **Nachwuchsgruppen**

##### Nachwuchsgruppe Dr. C. Meyer

Die Nachwuchsgruppe Dr. C. Meyer hat ihre Arbeiten zu Fullerenen und Carbon Nanotubes (CNT) erfolgreich fortgesetzt. Die Herstellung von Einzelwand-CNTs auf vordefinierten Substraten ist bereits Standard, erste Füllungen mit Fullerenen wurden ebenfalls demonstriert. Eine umfangreiche Charakterisierung, basierend auf Ramanspektroskopie und Transmissionselektronenmikroskopie, wurde etabliert, um die gefüllten CNT in ihren Eigenschaften studieren zu können. Der für die Quantentransportmessungen vorgesehene Mikrowellen-Kryostat wurde Ende 2007 geliefert und befindet sich gegenwärtig in der Testphase.

##### Nachwuchsgruppe Dr. K.M. Indlekofer

Die Nachwuchsgruppe beschäftigt sich mit "Many-Body Real-Time"-Prozessen und Transportphänomenen in Quantensystemen auf der Nanometerskala. Die Gruppe hat die WinGreen Simulation Software zur Simulation von Transportprozessen in Halbleiterschichten entwickelt und Rechnungen zur Simulation von Nano-FET durchgeführt. Herr Indlekofer wurde 2007 an die Fachhochschule Wuppertal berufen.

##### Nachwuchsgruppe (Dr. Wegewijs)

Die Nachwuchsgruppe hat sich im Sommer 2007 konstituiert und mit der Arbeit begonnen.

#### **Geförderte Anträge im Impuls- und Vernetzungsfonds**

##### Virtual Institute of Spin Electronics (VISel)

Im VISel arbeiten das II. Physikalische Institut der RWTH Aachen, das IV. Physikalische Institut der Universität Göttingen und das Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN-1) des Forschungszentrums Jülich zusammen. Die Arbeiten sind darauf ausgerichtet, die technologischen und physikalischen Grundlagen zum

Design von spinelektronischen Schaltungen zu klären. Die Arbeiten basieren auf dem Materialsystem GaN und den dazugehörigen ternären Verbindungen und konzentrierten sich im Jahr 2007 auf die Eigenschaften von AlGaIn/GaN-Quantendrähten, wie sie in zukünftigen spinelektronischen Schaltungen verwendet werden sollen. Die ermittelte reziproke Abhängigkeit der Spin-Orbit-Streulänge von der Skalierung der Quantendrähte ist eine erste Designregel für spintronische Schaltungen in diesem Materialsystem.

#### Virtuelles Institut Funktionale Molekülsysteme für die Informationstechnologie (IFMIT)

Im IFMIT sind das Institut für Anorganische Chemie und das Institut für Theoretische Physik der RWTH, sowie die Institute für Funktionale Nanostrukturen an Oberflächen (IBN-3) und Elektronische Materialien (IFF-6) zusammengeschlossen. Forschungsschwerpunkte sind die Entwicklung redox-aktiver Molekülsysteme als logische und/oder speichernde Funktionseinheiten, die Herstellung von Metallclustern zur Kontaktierung der Molekülsysteme herangezogen und die Untersuchung der Selbstorganisation auf konditionierten Substraten.

#### Virtuelles Institut für Hybridtechnologie (VIBHT)

Im VIBHT sind das Institut für Biologie II (Bio2), das Institut für Biologie VII (Molekulare Biotechnologie), das Institut für Werkstoffe der Elektrotechnik, Lehrstuhl 1 Mikrostrukturintegration (IWE) der RWTH Aachen, die Innere Medizin der Universität zu Köln, sowie das Institut für Bioelektronik (IBN-2) und Institut für Biologische Informationsverarbeitung (INB-2) zusammengeschlossen. Forschungsschwerpunkt ist die funktionelle Kopplung zellulärer Signale durch funktionelle Kopplung mit mikro- und nanotechnologischen Systemen und für den Einsatz in der Biomedizin und Informationstechnologie zu nutzen.

### **Preise**

Im Berichtsjahr 2007 wurden wieder mehrere Wissenschaftler durch hochrangige Preise ausgezeichnet:

- Prof. Peter Grünberg, IFF, wurde für seine auf die Jahre 1986 bis 1988 zurückgehenden Forschungsarbeiten am IFF mit dem Nobelpreis für Physik des Jahres 2007 ausgezeichnet. Er erhielt den Preis zusammen mit seinem französischen Kollegen, Prof. Albert Fert. Prof. Peter Grünberg erhielt im Jahr 2007 weiterhin:
  - die Stern-Gerlach Medaille, höchste Auszeichnung für Experimentalphysik der Deutschen Physikalischen Gesellschaft;
  - den Wolf-Preis für Physik der Wolf-Foundation, Israel;
  - den Japan-Preis, aus der Hand des japanischen Kaisers;
  - die erste Helmholtz-Professur, verliehen in Bonn.
- Prof. Peter Grünberg wurde von der RWTH-Aachen zusammen mit Albert Fert und Stuart Parkin mit der Ehrendoktorwürde ausgezeichnet.
- Prof. Siegfried Mantl erhielt den Jean Leblanc Award der Europäischen Gemeinschaft
- Prof. Takao Ohta, Kyoto, erhielt den Humboldt-Forschungspreis für einen Gastaufenthalt im IFF.
- Dr. rer. nat. Sergiy Balanetskyy erhielt den Preis der Nationalakademie der Wissenschaft der Ukraine für Junge Wissenschaftler
- Prof. Rainer Waser erhielt den "Ikeda Award" in Kyoto, Japan
- Dr. K. Shibuya erhielt den "Prize of the Marubun Company (Electronic Group)
- Dr. B. Lüssem erhielt den VDE-Promotionspreis 2007 für die beste Doktorarbeit aller elektrotechnisch/informationstechnischen Fakultäten des Landes Nordrheinwestfalen.
- Dr. M. Weides erhielt den "Klaus Liebrecht Preis" der Universität zu Köln
- Prof. Hans Lüth erhielt die Ehrendoktorwürde der Universität Mulhouse

### **Technologietransfer / Drittmittelprojekte**

- Bei der Entwicklung von Technologie für verspanntes Silizium und high-k-Materialien hat das FZJ Kooperationen mit den Firmen Qimonda, AMD, Siltronic, Leti, Aixtron und dem CNT Dresden. Ziel ist, die Technologie für schnelle Prozessoren bereitzustellen.
- In Zusammenarbeit mit Sony wird die Nanoimprint-Technologie zur Erzeugung von Crossbar-Schaltungen mit Leitungsbahnen unterhalb 100 nm für die Kontaktierung von Ladungstransfer-basierten Proteinen entwickelt. Ziel dieser Technik ist eine leichtere Verwendbarkeit von Proteinen in zukünftigen Sensoren.
- Die Firma Intel und das FZJ arbeiten zusammen an der Forschung zu einem nicht-flüchtigen Speicher auf der Basis von oxidischen Materialien. Ziel ist die Klärung von grundsätzlichen Fragen zum Materialeinsatz und dem Schaltmechanismus in Oxiden zum Einsatz in diesen Speichern.

- Die Firma EMISENS GmbH wurde als Spin-off gegründet. Das Ausgründungsprojekt erhielt den ersten Platz beim regionalen Gründerwettbewerb der Region Aachen (AC-Quadrat). Gegenstand der Ausgründung ist ein Verfahren zur Identifikation von Flüssigkeiten in geschlossenen Kanistern und Flaschen (MLI = Microwave Liquid Identification). Die Aktivitäten haben im Herbst 2006 begonnen (motiviert durch die versuchten Terroranschläge mit flüssigen Sprengstoff in London im Sommer 2006 und die sich daraus ergebenden Einschränkungen für die Mitnahme von Flüssigkeiten im Handgepäck von Flugpassagieren). Ein erster Prototyp für ein Flaschenkontrollgerät wurde auf der Hannovermesse 2007 der Öffentlichkeit vorgeführt.
- Der Senat der HGF hat einer gebäude- und gerätetechnischen Erweiterung des Ernst Ruska-Zentrums (ER-C) (Gesamtvolumen 5,3 Mio €) zugestimmt. Das Bauvorhaben für die Errichtung eines neuen Laborgebäudes ist angelaufen (geplanter Abschluss im Sommer 2009); die zusätzlich beschafften Elektronenmikroskope, Spektrometer und präparativen Einrichtungen stehen seit dem Jahreswechsel 2007 auf 2008 für den Nutzerbetrieb zur Verfügung.
- Das Jahr 2007 war zugleich das erste Jahr des "normalen" Nutzerbetriebs des ER-C. Vermittelt einer Verdoppelung der an den beiden Titan 80-300 Mikroskopen bearbeiteten Nutzerprojekte gegenüber 2006, wurden externe Auslastungsquoten an den beiden Spitzengeräten des ER-C von 47% bzw. 52% erreicht. Das FZJ beteiligte sich auch im Jahr 2007 federführend an dem HGF-Projekt "Deutsches Zentrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen". Projektpartner ist die RWTH Aachen.
- Im Rahmen eines über zwei Jahre angelegten Projekts "Precise Measurement of Optical Aberrations for Sub-Ångström Imaging in Scanning Transmission Electron Microscopy" mit der Firma FEI (vormals Philips Electron Optics, Eindhoven) ist das ER-C federführend an der Entwicklung numerischer Verfahren zur höchstpräzisen Messung und Korrektur elektronenoptischer Restaberrationen in aberrationsoptimierten Mikroskopen der neuesten Gerätegeneration beteiligt.
- Durch die Erfindung des Jülicher Verfahrens konnte verspanntes Si auf 200mm-Wafer übertragen und damit bei AMD Transistoren hergestellt werden. Der Ausgangsstrom konnte dadurch um bis zu 85% für Langkanaltransistoren und 15% für Kurzkanaltransistoren erzielt werden. Das Medea+ Projekt SILONIS - Strained Silicon on Insulator Substrates for high performance ICs - wurde mit dem Jean Leblanc Award der Europäischen Kommission ausgezeichnet. Projektpartner sind AMD, Aixtron, Siltronic, MPI Halle, FZJ, STM, Soitec, Leti.
- Im Rahmen des Medea-Projektes DECISIF - Device and circuit performance boosted through silicon material fabrication - wird das Jülicher Verfahren zur Herstellung von verspanntem Si von den Fa. Soitec und Siltronic erstmals für 300mm-Wafer erprobt und mit Soitec-Wafern verglichen werden. Es werden damit Transistoren mit hochverspannten Si- und Ge-Nanostrukturen mit high-k-Dielektrika für die 22nm-Generation hergestellt.
- Die vorhandenen Epitaxieanlagen und Prozessieranlagen werden im Rahmen des Projektes auf die 300mm-Wafer umgestellt. Neben dem CNT Dresden entsteht somit eine 300mm-Wafer-Forschungsplattform in Jülich, die in der Lage sein wird, high-k -Dielektrika, leitende Nitride und SiGe industriekompatibel abzuscheiden. Die beteiligten Industriefirmen und Partner sind AMD, Aixtron, Siltronic, STM, Soitec, Leti, MPI Halle, FZJ.
- NanoPULL - Pulling the limits of NANOCmos electronics ist ein integriertes EU-Projekt mit über 30 Partnern, das in einem sehr breiten Rahmen CMOS-Themen für die 32nm-Generation behandelt. Das Programm trägt hierzu insbesondere mit der Erforschung von Schottky-MOS-Feldeffekttransistoren bei.
- NANOSIL - Silicon-based nanostructures and nanodevices for long term applications - ist ein EU-Exzellenznetzwerk, das sich auf "More Moore" and "Beyond CMOS" beschäftigen. Das Programm trägt zur Forschung an verspannten Halbleitern bei, insbesondere Si und Ge, direkt aufgebracht auf einen Isolator, alternative Gatedielektrika mit hohen Permittivitäten und Nanowire-Transistoren.

Über das Programm ist das Forschungszentrum Jülich Mitglied des ITRS (International Technology Roadmap for Semiconductors) Konsortiums für Emerging Research Devices, in MEDEA+, von ENIAC (European Nanoelectronic Initiative Advisory Council und Gründungsmitglied vom AENEAS (Association for European NanoElectronics Activities).

### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

Im Überzeichnungsvorhaben "**Nanoarchitecture Laboratory (NAL)**" konnten im Jahre 2007 entscheidende Schritte in Richtung der Integration von resistiv schaltenden Dünnschichten in Nanocrossbar-Architekturen erzielt werden. Basierend auf zwei unterschiedlichen elektrischen Widerständen, welche die Schaltzustände "0" und "1" repräsentieren, ist es so möglich, rekonfigurierbare Logik-Applikationen und nicht-flüchtige Speicher mit einer besonders hohen Speicherdichte zu realisieren.

Dazu wurden mehrere Aspekte intensiv bearbeitet. Zum einen wurden verschiedene Dünnschichten (TiO<sub>2</sub>, GeSe, WO<sub>3</sub>) abgeschieden und deren Eigenschaften untersucht, um Erkenntnisse über den Schaltmechanismus und zum Verhalten im Bauteil ableiten zu können. Zum anderen wurden Integrationstechnologien zur kostengünstigen und schnellen Nanostrukturierung von großflächigen Substraten entwickelt. In einem dritten Arbeitsfeld wurden zusammen mit unseren Partnern von der RWTH Aachen (EECS und IWE 2) Konzepte und Strategien erarbeitet, die das Beschreiben und das Auslesen eines auf Widerstandsänderungen basierenden Speichers ermöglichen.

Highlights waren dabei:

- Die Abscheidung von GeSe-Dünnschichten in Verbindung mit einer oxidischen Barriere, die stabiles Schaltverhalten mit einem hohen Widerstandsverhältnis aufweisen. Außerdem konnte an "high pressure sputtered" WO<sub>3</sub>-Dünnschichten Widerstandsschalten mit einer Strombegrenzung im nA-Bereich beobachtet werden.
- Erstmals wurde ein 64x64-Bit Array mit einer Strukturbreite von 100 nm realisiert und darin resistiv schaltende TiO<sub>2</sub>-Dünnschichten integriert. Dazu wurde eine speziell abgestimmte Elektronenstrahlithographie in Verbindung mit Lift-off-Technik eingesetzt.
- Als kostengünstige und schnelle Strukturierungsmethode wurde die Nanoimprintlithographie (NIL) eingeführt und den besonderen Bedürfnissen angepasst. Dazu mussten sowohl Fragenstellungen in Bezug auf Alignment und Planarisierung gelöst, als auch unterschiedliche Verfahren (UV-Imprint bzw. thermischer Imprint) evaluiert werden. Mit selbst hergestellten Molds und UV-NIL ist es gelungen, 30 nm breite Einzelkontakte bzw. 64 x 64 Bit große Crossbararrays herzustellen und TiO<sub>2</sub> zu integrieren. Die Ergebnisse wurden auf einer internationalen Fachkonferenz vorgestellt.
- Simulationen zum Hybridansatz (aktive CMOS-Technologie in Verbindung mit passiven Crossbararrays) haben gezeigt, dass ein nichtlineares Widerstandsverhalten der Materialien, insbesondere des ON-Widerstandes, die maximale Arraygröße in Speicherapplikationen positiv beeinflussen. Die Ergebnisse wurden ebenfalls auf einer internationalen Fachkonferenz vorgestellt.

## Weitere Programmentwicklung

### Strukturelle Aspekte

Für die nächste HGF-Periode der Finanzierung 2010-2014 ist geplant, die Forschungsaktivitäten des HGF-Programms "Kondensierte Materie" aus dem Forschungsbereich "Struktur der Materie" in den Forschungsbereich "Schlüsseltechnologien" zu überführen. Hiermit folgen wir der Empfehlung des HGF-Senats, die Verbindung zum Programm "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen" zu verstärken. Ein neues Topic über grundlegende physikalische Phänomene und Methoden innerhalb des neuen Programms wird daher die gegenwärtigen Aktivitäten zu elektronischen und magnetischen Eigenschaften des Programms "Kondensierte Materie" einbringen. Hierzu gehört ebenfalls die Untersuchung starker elektronischer Korrelationen im Hinblick auf die Eigenschaften elektronisch aktiver Materialien.

Auf einer Klausurtagung im August 2007 haben sich die Institutsleiter der Institute IBN und IFF auf die grundlegende Struktur eines neuen Programms "Fundamentals of Future Information Technology" (FFIT) geeinigt. Das Programm führt das bisherige Programm "Information Technology with Nanoelectronic Systems" und das Topic 1 "Electronic and Magnetic Phenomena" sowie Teile des Topic 2 "From Matter to Materials" des bisherigen Programms "Condensed Matter" zusammen.

Dadurch ist es gelungen, die in beiden Departments vorhandene Expertise in der Materialvielfalt, Analytik und Theorie im Vergleich zur PoF1 auf eine noch breitere Basis zu stellen und zu neuen Themen zu vereinigen. Das Programm wird von dem fruchtbaren Spannungsfeld zwischen der explorativen Grundlagenforschung an völlig neuartigen Phänomenen und Materialien auf der einen Seite und der Forschung an avancierten Bauelementen auf der anderen Seite getragen. Dies baut das bereits bisher vorhandene Alleinstellungsmerkmal unseres Programms in der Helmholtz-Gemeinschaft aus und stärkt erheblich den Verbund JARA-FIT mit der RWTH Aachen.

Folgende vier Topics wurden vereinbart:

- Topic 1 - Frontiers of Charged Based Electronics
- Topic 2 - Spin Based and Quantum Information
- Topic 3 - Sensorics and Bio-inspired Systems

- Topic 4 - Exploratory Materials and Phenomena

Dieses Vorhaben wird zusätzlich unterstützt werden durch die neuformierte Jülich-Aachen Research Alliance (JARA) mit ihrem Fokus auf experimenteller und theoretischer Forschung zu Grundlagen zukünftiger Informationstechnologie. Durch den Zusammenschluss der insgesamt 22 Institute des FZJ und der RWTH Aachen ergibt sich für das Programm eine neue Ausgangssituation in Lehre und Forschung. Durch die intensive Verschränkung der Kompetenzen und Ressourcen entsteht eine neue Qualität in der zukünftigen Forschung.

Die zukünftige Entwicklung soll unterstützt werden durch den Aufbau einer Technologie-Plattform für Nanoelektronik im Forschungszentrum Jülich, die Helmholtz Nanoelectronic Facility. Mit dieser Technologieplattform sollen großforschungsspezifisch alle Instrumentierungen und Prozesse gebündelt werden, die für eine interdisziplinäre und explorative Forschung an elektronischen Materialien, neuartigen Bauelementkonzepten und Systemen in der Informationstechnologie notwendig sind. Im Bereich der Entwicklung und Strukturierung von Materialien und Verbundsystemen sowie deren Charakterisierung und Technologie soll damit eine neue Qualität für die Helmholtz-Gemeinschaft, die RWTH Aachen und externe Nutzer erreicht werden. Die Technologieplattform wird somit der Grundstein für die weitere Entwicklung der Informationstechnologie auf der Nanometerskala. Die erste Stufe der Technologieplattform wurde beantragt und positiv begutachtet. Es ist beabsichtigt, die konkreten Planungen dazu im Sommer 2008 zu beginnen.

### **Personelle Aspekte**

Die Nachfolge von Prof. H. Ibach und Prof. H. Lüth als Direktoren von IBN-1 und IBN-3 wurde jeweils abgeschlossen durch neuberufene Direktoren: Herrn Prof. D. Grützmacher und Prof. S. Tautz..

a) Prof. D. Grützmacher am IBN-1 hat zwei neue Vorhaben auf den Weg gebracht, um die Forschungsaktivitäten innerhalb des Programms Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen zu stärken. Das HOT-GaN-Projekt befasst sich mit der Integration eines Hochenergie-Hochfrequenzoszillators mit nanoelektronischer Frequenzmultiplikation zur Erzeugung von Terahertzschwingungen. Das WQUIT-Projekt befasst sich mit der Untersuchung von Nanodrähten für Quanteninformationstechnologie. Insbesondere indiumbasierte Halbleiter wie InAs, InN und auch InSb werden untersucht, um Modellsysteme zu identifizieren, die Einzelelektronenphänomene und Spinmanipulation ermöglichen. Die Einrichtung von CVD- und MBE-Systemen für die Epitaxie von SiGe-Nanostrukturen soll die Herstellung von siliziumbasierten Quantendrähten und Quantenpunktstrukturen erlauben und zu einem verstärkten Überlapp von Silizium- und III/V-Technologie führen. Zu diesem Zweck ist auch die Integration optoelektronischer Komponenten auf Silizium geplant.

b) Prof. S. Tautz wird sich auf das dynamisch in Entwicklung befindliche Feld Molekularer Nanowissenschaften konzentrieren, an der Grenze zwischen Physik, Chemie, Biologie und Ingenieurwissenschaften. Die Untersuchung von Eigenschaften zur Strukturelektronik und Ladungstransport von Hybridsystemen, die aus Molekülen und anorganischen Nanostrukturen zusammengesetzt sind, stellt eine besondere Herausforderung dar. Hierbei gilt den Selbstorganisationsprozessen dieser Materialien zur direkten Ausbildung von Nanostrukturen an Oberflächen besondere Aufmerksamkeit. Das Studium solcher organisch-anorganischen Hybridstrukturen wird eine wesentliche Grundlage für Anwendungen in der Molekularen Nanoelektronik, die neue Optionen für zukünftiges Hochleistungsrechnen bieten kann.

---

[☞ Detailergebnisse](#)

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Physik der Hadronen und Kerne

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 5 Struktur der Materie
- **5.3 Physik der Hadronen und Kerne**
- 5.3.1 Hadronen-Struktur und -Dynamik

**Beteiligte Institute:** [IKP](#), [ZAT](#), [ZEL](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Hans Ströher, IKP, [h.stroeher@fz-juelich.de](mailto:h.stroeher@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)

## Highlight

### Untersuchungen zum Verhalten polarisierter Teilchen im Kühlersynchrotron COSY

Im Rahmen einer internationalen Kollaboration ("Spin@COSY") wird das Verhalten der "Polarisation" von gespeicherten Fermionen- (Spin-1/2, Protonen) und Bosonen- (Spin-1, Deuteronen) und Möglichkeiten der Einflussnahme durch die Anregung künstlicher Spinresonanzen untersucht, um so herauszufinden wie diese Strahlen optimal auf hohe Energien beschleunigt werden können, ohne ihre Polarisation zu verlieren.

Zur Spinmanipulation wurde zunächst ein HF-Dipolmagnet, später ein wassergekühlter RF-Solenoid mit longitudinalem Magnetfeld verwendet. Ein Test des sog. "Chao Matrix Formalismus", mit dem die Strahlpolarisation nach Durchlaufen einer Spinresonanz berechnet wird, wurde kürzlich in der Fachzeitschrift Physical Review Letters publiziert; ein weiteres Resultat ist zur Veröffentlichung eingereicht. Es zeigt sich, dass die experimentellen Ergebnisse die Gültigkeit des Chao-Formalismus bestätigen.

Eine interessante Anwendung der Spinmanipulation ist die genaue absolute Eichung der COSY-Strahlenergie über die Vermessung einer künstlichen Spinresonanz mit bisher nie erreichter Genauigkeit. Mit dieser Methode ist vor kurzem ein Experiment zur präzisen Bestimmung der Masse von eta-Mesonen in der Reaktion  $d + p \rightarrow 3\text{He} + \eta$  an COSY durchgeführt worden - damit soll die vorhandene Diskrepanz zwischen unterschiedlichen bisherigen Messungen geklärt werden: handelt es sich dabei um Messfehler (bspw. die Unterschätzung systematischer Unsicherheiten) oder steckt "Physik" dahinter (unterschiedliche Methoden selektieren verschiedene Komponenten des eta-Mesons)?

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Die Arbeiten des Forschungszentrums Jülich zur "Physik der Hadronen und Kerne" haben zum Ziel, ein vertieftes Verständnis der starken Wechselwirkung der Materie zu erreichen auf der Grundlage der fundamentalen Bausteine, der Quarks und Gluonen. Man will verstehen, wie die "Natur" die Hadronen aus Quarks und Gluonen erzeugt. Da diese nicht frei, sondern immer in Form von Hadronen beobachtet werden, kann man experimentell nur durch Untersuchungen von hadronischen Systemen ? Baryonen, Mesonen und mögliche exotische Zustände (siehe "Highlight") ? Fortschritte erreichen. Mit ihrer Thematik stellt die Hadronenphysik einen Eckpfeiler für die moderne Physik und eine Brücke zwischen Kernphysik/Nukleare Astrophysik auf der einen und der Elementarteilchenphysik/Teilchenastrophysik auf der anderen Seite dar.

Die Jülicher Arbeiten konzentrieren sich in Zusammenarbeit mit der GSI auf das Thema "Hadronen-Struktur und -Dynamik". Die experimentellen Untersuchungen werden mit Hilfe des Kühlersynchrotrons COSY durchgeführt, welches unpolarisierte und polarisierte Protonen und Deuteronenstrahlen mit Impulsen bis zu 3,7 GeV/c zur Verfügung stellt. Durch Anwendung von zwei Kühlverfahren werden Teilchenstrahlen höchster Phasenraumdichte erzeugt, die es erlauben, Präzisionsexperimente mit einer bisher nicht erreichten Genauigkeit durchzuführen. Als Zielkerne kommen hochkomplexe kryogene Gas- und Flüssigwasserstoff- bzw. Deuteriumtargets sowie extrem dünne Folien zum Einsatz. Detektorsysteme, die entweder in den Beschleunigerring integriert oder an externen Strahlplätzen aufgebaut sind, filtern die bei den Reaktionen entstehenden Reaktionsprodukte derart, dass gezielt bestimmte Reaktionsmechanismen untersucht werden können. Mit dem im Berichtszeitraum in Betrieb gegangenen WASA-Detektor steht nun ein Nachweisgerät für Photonen zur Verfügung, welches die Detektoranordnungen an internen Targetplätzen bzw. am extrahierten Strahl von COSY vervollständigt. Mit dem im Berichtszeitraum in den COSY-Ring eingebauten WASA-Detektor wird das Experimentiergerät an COSY für Photonennachweis vervollständigt. In enger Zusammenarbeit mit den experimentellen Arbeitsgruppen führt die Theoriegruppe Analysen und Rechnungen, basierend auf effektiven Feldtheorien, durch, die zu einem tieferen Verständnis von Reaktionsmechanismen, Strukturen und zugrundeliegenden Symmetrien führen. Darüber hinaus werden Untersuchungen zur Verbindung hadronischer und elektromagnetischer Sonden durchgeführt, die insbesondere auch relevant sind für die Forschungen an DESY, ELSA, MAMI und anderen Forschungsanlagen.

COSY gehört zu den weltweit wichtigen Forschungsgeräten der Hadronenphysik, welches im Rahmen der Verbundforschung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) auf nationaler Ebene sowie im Rahmen des europäischen Forschungsprogramms als einer der herausragenden Beschleuniger des "Light Ion Facilities Europe" (LIFE)-Programms gefördert wird. Die vielfältigen Experimentiermöglichkeiten an COSY werden durch Wissenschaftler von deutschen und ausländischen Forschungseinrichtungen genutzt. Die Vergabe von Strahlzeiten für Experimente erfolgt nach wissenschaftlicher Begutachtung durch ein international besetztes Komitee (PAC) entsprechend der physikalischen Bedeutung der Experimente.

Das geplante FAIR-Projekt (Facility for Antiproton and Ion Research) der GSI (Darmstadt) eröffnet der Hadronenphysik in der Zukunft mit dem Antiprotonen-Speicherring HESR zusammen mit dem Detektorsystem PANDA völlig neue experimentelle Möglichkeiten. Der HESR stellt beschleunigertechnisch wegen der von den Experimentatoren geforderten Parameter eine besondere Herausforderung dar. Da COSY in vielerlei Hinsicht dem HESR ähnelt (Kühlersynchrotron, Kühlmechanismen, Verwendung von internen Targets), hat das IKP/FZJ in dem HESR-Konsortium für Planung, Bau und Betrieb die Federführung übernommen. Das Physikprogramm und die Detektorentwicklungen im Zusammenhang mit PANDA stellen eine konsequente Fortsetzung der experimentellen Aktivitäten des Instituts dar. Jülich wird wegen seiner Expertise eine führende Rolle bei der Entwicklung der inneren Spurdetektoren von PANDA übernehmen. Des Weiteren beteiligt sich das Forschungszentrum an Vorarbeiten für die Erzeugung von polarisierten Antiprotonen (PAX, Polarized Antiproton Experiment) sowie für niederenergetische Antiprotonen (FLAIR, Facility for Low-Energy Antiproton and Heavy-Ion Research) im Rahmen des FAIR-Projektes.

Die Jülicher Arbeiten sind eingebunden in das Helmholtz-Programm "Physik der Hadronen und Kerne", das gemeinsam mit der GSI bearbeitet wird. Es bestehen außerdem Beteiligungen an externen, internationalen Aktivitäten, dem ATRAP-Experiment (Antiwasserstoff) am CERN und der Untersuchung von pionischen Wasserstoffisotopen (H, D) am PSI (Villigen, Schweiz).

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

#### **WASA@COSY nimmt Experimentierbetrieb auf**

Der WASA-Detektor, der im Herbst 2005 von Uppsala (Schweden) nach Jülich gebracht worden war, wurde - nach entsprechenden Wartungs- und Reparaturarbeiten - während einer COSY-Strahlpause von knapp 3 Monaten im Sommer 2006 in den COSY-Ring eingebaut und anschließend in Betrieb genommen. Gleichzeitig wurde ein Großteil der Ausleseelektronik sowie eine Reihe von Detektorkomponenten ersetzt. Die aufwendigen Arbeiten konnten nur durch die intensive Zusammenarbeit mit ZAT und ZEL in so kurzer Zeit durchgeführt werden. WASA komplettiert die Detektorausstattung an COSY durch die Möglichkeit, Photonen zusammen mit geladenen Reaktionsprodukten in einem großen Raumwinkelbereich nachzuweisen und führt seit Anfang 2007 Messungen mit Protonen- und Deuteronenstrahlen von COSY durch. Neben Untersuchungen von Symmetrieverletzungen in eta- und eta-prime- Zerfällen stehen dabei

Experimente zur Isospinbrechung in hadronischen Reaktionen sowie die Klärung der Ursache für den sog. ABC-Effekt im Fokus.

### **ANKE führt erstes Doppelpolarisationsexperiment durch**

Nach erfolgreichem Einbau der Atomstrahlquelle (ABS) am Targetplatz des ANKE-Detektors im COSY-Ring und anschließender Inbetriebnahme konnte eine erste Messung mit polarisiertem Deuteronstrahl und polarisiertem Protonentarget in Form einer Speicherzelle durchgeführt werden. Derartige Doppelpolarisationsexperimente sind extrem aufwendig; sie gehören wegen der geringeren Teilchenzahlen sowohl von Strahl als auch von Target zu den wohl schwierigsten Messungen. Die gewonnenen Daten stellen allerdings auch die größte Herausforderung für theoretische Interpretationen dar. Nach dem erneuten Einbau des polarisierten Targets im Verlauf des Jahres 2008 werden die Doppelpolarisations-Messungen weitergeführt.

### **Isolierung des Lambda(1405)-Teilchens gelungen**

Unter der Vielzahl der angeregten Zustände von Hyperonen ist das Lambda(1405) (die Zahl steht für die Masse des Objekts in MeV) das am wenigsten verstandene. Eine neuere Hypothese geht davon aus, dass es sich dabei tatsächlich um einen 2-Teilchenzustand handelt. Um dies experimentell zu untersuchen, muss man das Lambda(1405) eindeutig isolieren - dies ist bislang wegen des Überlapps mit einem anderen Resonanzzustand (Sigma(1385)) nicht gelungen. An ANKE konnte nun erstmals in einem speziellen Zerfallskanal, der Lambda selektiert, die Resonanzform vermessen werden - die gewonnenen Erkenntnisse sind kürzlich in einer Fachzeitschrift (Physics Letters B) veröffentlicht worden.

### **Hinweise auf ein Meson-Kern System**

In zwei unabhängigen Präzisionsexperimenten an COSY (ANKE und COSY-11) ist die Reaktion  $dp \rightarrow \eta^+ 3\text{He}$  im Bereich der  $\eta$ -Produktionsschwelle untersucht worden. Dabei wurde die Anregungsfunktion sowie die Winkelverteilung mit bisher nie erreichter Genauigkeit vermessen: der Wirkungsquerschnitt zeigt einen starken Anstieg von Null auf den Endwert von 400 nb innerhalb einer minimalen Energieänderung des Deuteronenstrahles von nur 0,5 MeV. Die Asymmetrie der Winkelverteilung beginnt "verzögert" etwa 2 MeV oberhalb der Schwelle: beide Beobachtungen sind mit einem quasi-gebundenen Zustand von neutralem  $\eta$ -Meson und  $3\text{He}$ -Kern konsistent (Ergebnisse sind veröffentlicht in Physics Letters B und Physical Review Letters). In künftigen Experimenten mit polarisiertem Deuteronstrahl soll dieser Zustand genauer untersucht werden. Davon verspricht man sich aufgrund des zwar kleinen, aber endlichen Überlapps der  $\eta$ -Wellenfunktion mit dem  $3\text{He}$ -Kern neue Erkenntnisse über mögliche Medium-Modifikationen von Hadronen - in diesem Falle von  $\eta$ -Mesonen - in Kernmaterie.

### **ANKE vermisst die Masse des eta-Mesons**

Die Bestandsaufnahme von bisherigen Bestimmungen der Masse des  $\eta$ -Mesons ergibt eine Diskrepanz, d.h. einen "hohen" und eine "niedrigen" Wert, die einer Klärung bedarf. Mit der Technik, die COSY-Strahlenergie über eine Spinresonanz präzise zu vermessen (siehe "Highlight"), eröffnet sich die Möglichkeit, mittels genauer Bestimmung des Impulses der erzeugten  $\eta$ -Mesonen auf deren Masse zurück zu schließen. Das entsprechende Experiment wurde mit einem umlaufenden (teilweise polarisierten d-Strahl) erfolgreich durchgeführt und wird derzeit analysiert.

### **PAX untersucht COSY-Strahl- und Polarisationslebensdauer**

Für die zukünftigen Untersuchungen der PAX-Kollaboration zum Polarisationsaufbau eines zirkulierenden internen COSY-Strahls ("SpinFiltering") ist es notwendig, die Strahl- und Polarisationslebensdauer in COSY genau zu untersuchen bzw. zu optimieren: bspw. wird die Strahllebensdauer entscheidend für die zu erreichende Polarisation des Strahl sein. Vorexperimente zeigen, dass die gemessene Lebensdauer etwa eine Größenordnung kleiner als die Erwartung ist - die Ursache für diese Diskrepanz zu verstehen und zu beseitigen ist primäre Aufgabe der zukünftigen Arbeiten.

### **Simulationen von Neutronenmaterie**

Es wurden Monte-Carlo-Simulationen von Neutronenmaterie in der Nähe des so genannten unitären Limes durchgeführt. Die auftretenden Parameter wurden in einer Analyse von np-Streudaten bestimmt. Es konnten

daher parameterfrei der sogenannte "xi"-Parameter und auch Korrekturen durch die endliche Streulänge und die effektive Reichweite bestimmt werden. Des Weiteren wurden die systematischen Fehler durch verschiedene Diskretisierungen der Kontinuums-Wirkung studiert.

### Theorie hadronischer Moleküle

In den letzten Jahren wurden eine Reihe unerwarteter Zustände mit charm Quarks gefunden, deren Struktur mysteriös ist. Insbesondere liegt die Nähe des  $X(3872)$  und auch des  $X(3875)$  zur  $DD_{\bar{}}$ -Schwelle nahe, daß es sich um hadronische Moleküle handelt. Unter dieser Annahme wurden die Zerfallskanäle ( $J/\Psi \pi \pi$ ) und ( $DD_{\bar{}} \pi$ ) analysiert; es konnte gezeigt werden, daß es sich bei dem  $X(3872)$  und  $X(3875)$  um die Manifestation eines virtuellen Zustandes handelt.

**COSY** (siehe Großgerät COSY)

### Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)

COSY ist über die Nutzergemeinde (insbesondere CANU, die COSY Association of Networking Universities) mit vielen nationalen und internationalen Universitäten und Forschungseinrichtungen vernetzt; neben unserem HGF-Partnerinstitut in der programmorientierten Förderung, der GSI (Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt) sind dies: die Universitäten Bonn, Bochum, Dresden, Erlangen, Gießen, Köln, Hamburg, Münster und Tübingen sowie das Forschungszentrum Rossendorf, die Universitäten Krakau, Silesia, Warschau und das Andrzej Soltan Institute Swierk (Polen), die Universitäten Uppsala und Stockholm (Schweden), die Michigan State University, UCLA und JLab (USA), die Universitäten Ferrara, Messina und Turin (Italien), die Moscow State University, JINR Dubna, PNPI Gatchina, INR Moskau, ITEP Moskau und BINP Novosibirsk (Russland), die Tbilisi State University (Georgien), die Universität von Sofia (Bulgarien), die Universität von Kosice (Slowakei), das University College London (GB), BARC in Mumbai (Indien) und das Forschungszentrum GANIL (Frankreich).

Die vier Direktoren des IKP sind nach dem Jülicher Modell bzw. inversen Jülicher Modell (Prof. Meißner) berufen und haben Lehrstühle an umliegenden Universitäten inne; 19 weitere Mitarbeiter des IKP haben Lehraufträge an Universitäten des In- und Auslands: sie tragen damit in erheblichem Maß zur Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses bei.

Es bestehen zahlreiche vertragliche Zusammenarbeitsvereinbarungen, vorwiegend mit deutschen Hochschulen, über Fremde FE-Verträge, bei COSY im Berichtszeitraum 45.

Im Berichtszeitraum wurden im Zusammenhang mit Arbeiten am IKP(COSY) im Rahmen der PoF 5 Diplom- und 7 Doktorarbeiten abgeschlossen.

Von den Wissenschaftlern des IKP wurden im Berichtszeitraum die folgenden internationalen wissenschaftlichen Meetings mitorganisiert: (i) MENU2007 (Chair: Prof. S. Krewald, Prof. H. Machner) und (ii) ANKE / PAX Workshop on SPIN PHYSICS, Ferrara (F. Rathmann), Daneben wurde im Dezember im Physikzentrum in Bad Honnef das alljährlich stattfindende Treffen der COSY-Nutzergemeinde, diesmal zusammen mit einem COSY-FFE Seminar, durchgeführt.

Im November wurde das Virtuelle Institut "Spin and Strong QCD" (Sprecher: Prof. U.-G. Meißner (IKP-3 und Universität Bonn) gestartet.

Das IKP ist an folgenden EU-Programmen beteiligt:

- EURONS (EUROpean Nuclear Structure physics), I3; IKP-Anteil 0,3 M€, und
- Hadron Physics, IKP-Anteil 0,3 M€

## Weitere Programmentwicklung

Das Forschungsprogramm wird sich zukünftig entlang folgender Leitlinien weiterentwickeln:

- Nutzung von COSY für die Hadronenphysik
- Forschung und Entwicklung an COSY für das FAIR-Projekt

- Beteiligung an Konzeption und Realisierung von HESR, PANDA, sowie PAX und FLAIR an FAIR
- Theoretische Analyse von experimentellen Daten
- (Weiter-)Entwicklung von Modellen und Theorien

### **Hadronenphysik mit Protonen- und Deuteronen-Strahlen an COSY**

Das Physikprogramm fokussiert sich auf die zentralen Fragen der Quantenchromodynamik:

- welche Rolle spielen Symmetrien und deren Brechung in der starken Wechselwirkung,
- welche Quark-Gluon-Bindungszustände existieren in der Natur beziehungsweise scheinen nicht realisiert,
- wie sieht das Anregungsspektrum des Nukleons aus, und
- wie lässt sich die baryonische Wechselwirkung aus der fundamentalen Farbkraft verstehen?

Um das damit verknüpfte Forschungsprogramm effektiv durchführen zu können, hat sich das Institut auf drei große Detektorsysteme beschränkt, die existierenden Anlagen ANKE und TOF und den neuen, nahezu den vollen Raumwinkel abdeckenden photonempfindlichen Detektor WASA.

Meilensteine im Jahr 2008

- Durchführung neuer Experimente an WASA (insbesondere Eta-Zerfälle)
- Nutzung des polarisierten internen Targets (PIT) an ANKE und polarisierten COSY Teilchenstrahlen für Doppelpolarisationsexperimente
- Einbau von so genannten Straw-Detektoren in den TOF-Detektor zur Erhöhung der Auflösung sowie der Detektorakzeptanz
- Untersuchung des Einflusses des Elektronenkühlers auf einen polarisierten Protonenstrahl zur möglichen Nutzung für die Erzeugung polarisierter Teilchenstrahlen (für FAIR)
- Detailuntersuchungen zur Spin-Manipulation von Teilchenstrahlen in Speicherringen
- Analyse der Hyperon-Nukleon-Wechselwirkung im Rahmen der chiralen effektiven Feldtheorie
- Berechnung der Vier-Nukleonen-Kraft zur Ordnung NNNLO ("next-to-next-to-next-to-leading order") in der effektiven Feldtheorie
- Präzise Berechnung der dispersiven Korrekturen zur Pion-Deuteron-Streulänge im Rahmen der chiralen Störungstheorie

### **Forschung und Entwicklung an COSY für FAIR**

Grundlegende Untersuchungen für die Realisierung des HESR an FAIR und Prüfung der technischen Machbarkeit von u.a. Hochenergie-Elektronenkühlung in Kombination mit Stochastischer Kühlung, Polarisation von Strahlen mit der Spin-Filter-Methode (z. B. an ANKE), Strahl-Target-Wechselwirkung mit hochdichten "Pellet-Targets" (an WASA) und polarisierten Targets (PIT, an ANKE sowie an TOF).

Die an COSY durchgeführten Experimente sind unerlässlich, um nachhaltig eine hochqualifizierte Gruppe von Physikern heranzubilden, die in der Durchführung von Experimenten zur Hadronenphysik mit hadronischen Sonden mit internen Targets und komplexen  $4\pi$  Detektoren erfahren sind, wie sie zukünftig mit PANDA am HESR vorgesehen sind.

Meilensteine im Jahr 2008

- Durchführung von Testmessungen an COSY zum Polarisationsaufbau mittels "Spin-Filtering"
- Testmessungen an den TOF-Straw-Detektoren für den Einsatz in PANDA

### **Realisierung von HESR, Beteiligung an PANDA, Vorarbeiten für PAX und FLAIR**

Aktive Teilnahme an der Realisierung von FAIR bei GSI (Darmstadt), insbesondere für den Hochenergie-Speicherring (HESR), für dessen Konzeption und Bau (sowie den späteren Betrieb) das IKP die führende Rolle innerhalb eines internationalen Konsortiums übernommen hat. Darüber hinaus leistet das IKP im Rahmen einer großen internationalen Kollaboration wesentliche Beiträge zum Design, Aufbau und Physikprogramm des PANDA-Detektors für den HESR. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt dabei bei dem Target und den Detektoren um den Wechselwirkungspunkt: dem "Micro-Vertex" Detektor und dem "Straw-

Tube-Tracker". Sowohl die Arbeiten für HESR als auch an den PANDA Detektor geschehen in enger Zusammenarbeit mit den Infrastrukturabteilungen ZAT und ZEL des FZJ. Des Weiteren werden wesentliche Vorarbeiten für PAX und FLAIR vorangetrieben.

#### Meilensteine im Jahr 2008

- Erarbeitung technischer Spezifikationen für HESR-Komponenten
- Einfahren und Betrieb der "Barrier-bucket Cavity" (Prototyp) für den HESR
- Durchführung von Tests für den PANDA "Straw-tube Tracker" und für "Microvertex"-Detektoren
- Planung der Vorlaufexperimente für den effektiven Polarisationsaufbau von Protonen bzw. Antiprotonen
- Anwendung und Weiterentwicklung effektiver Feldtheorien auf Systeme von leichten und schweren Quarks

---

[☞ Detailergebnisse](#)

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Kondensierte Materie

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 5 Struktur der Materie
- **5.4 Kondensierte Materie**
- 5.4.1 Elektronische und magnetische Phänomene
- 5.4.2 Von Materie zu Materialien
- 5.4.3 Weiche Materie und Biophysik

**Beteiligte Institute:** [IBN](#) [IFF](#) [ZAT](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Heiner Müller-Krumbhaar, [h.mueller-krumbhaar@fz-juelich.de](mailto:h.mueller-krumbhaar@fz-juelich.de)

---

[Publikationen](#)  
[Patente](#)

---

## Highlight

### Ultradünne magnetische Filme haben Sinn für Drehungen

Strukturen, deren Bild und Spiegelbild sich nicht durch Drehen ineinander überführen lassen, nennt man chiral. So kommen beispielsweise in der Natur viele Biopolymere, wie etwa Aminosäuren, die Bausteine von Eiweiß, nur in einer von zwei theoretisch vorstellbaren Varianten vor, sie sind homochiral. Die Homochiralität natürlicher Biopolymere und die CP-Verletzung der elektro-schwachen Wechselwirkung sind zwei faszinierende Beispiele, wo die Natur ein Objekt und sein Spiegelbild unterschiedlich behandelt. An der Oberfläche magnetischer Materialien sollte durch relativistische Streuung der Elektronen eine magnetische sog. Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung (DMW) entstehen, die homochirale Spinstrukturen verursachen könnte. Wir konnten nun erstmalig die Stärke der DMW berechnen und für einen ultradünnen magnetischen Film auf einem Wolframsubstrat eine linksdrehende zyklonale magnetische Struktur vorhersagen, die inzwischen von Kollegen aus Hamburg mittels eines spin-polarisierten Rastertunnelmikroskops experimentell bestätigt wurde. Die linksdrehende Händigkeit der magnetischen Struktur ist universell in dem Sinne, dass sie als eine Definition der Linkshändigkeit im ganzen Kosmos genutzt werden könnte.

*Bode, M.; Heide, M.; von Bergmann, K.; Ferriani, P.; Heinze, S.; Bihlmayer, G.; Kubetzka, A.; Pietzsch, O.; Blügel, S.; Wiesendanger, R., Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry, Nature, 447 (2007), 190*

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Phänomene und Mechanismen sollen aufgeklärt werden, die sich aus dem komplexen Zusammenspiel der elektronischen, atomaren und molekularen Komponenten von Flüssigkeiten und Feststoffen ergeben. Das Programm Kondensierte Materie befasst sich insbesondere mit multiskaligen Phänomenen in Feststoffen und Flüssigkeiten und schwerpunktmäßig mit den drei Themen "Elektronische und Magnetische Phänomene Kondensierter Materie", "Von Materie zu Materialien" und "Weiche Materie und Biophysik". Eine Vielzahl experimenteller und theoretischer Methoden wird benutzt und fortentwickelt. Experimentell stehen Neutronenstreuung, Synchrotronstrahlung und Elektronenmikroskopie im Vordergrund. In den theoretischen Untersuchungen werden sowohl analytische als auch numerische Verfahren benutzt und weiterentwickelt. Die Erforschung kondensierter Materie ist strategisch verknüpft mit dem Programm "Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen" und mit anderen materialbezogenen HGF-Programmen wie z.B. "Informationstechnologie mit Nanoelektronischen Systemen", "Wissenschaftliches Rechnen",

"Nanotechnologie", "Erneuerbare Energien", "Effiziente Energieumwandlung" und "Funktion und Dysfunktion des Nervensystems".

# Programmergebnisse

## Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

### Topic 1: Elektronische und magnetische Phänomene

#### Korrelierte Elektronensysteme

Materialien mit stark korrelierten Elektronen zeichnen sich durch eine außergewöhnliche Fülle elektronischer Phasen aus, die nicht nur aus physikalischer Sicht, sondern auch im Hinblick auf praktische Anwendungen äußerst interessant sind.

Die außergewöhnliche Empfindlichkeit der elektronischen und magnetischen Eigenschaften von Übergangsmetalloxiden bezüglich kleinster Änderungen von Parametern wie Temperatur, Druck oder Dotierkonzentration ist eine äußerst wichtige Materialeigenschaft. Ein Phänomen von besonderem Interesse ist der Übergang von einem Metall zu einem Isolator, bekannt unter dem Stichwort Mott-Übergang, durch Kontrolle der Dotierkonzentration. Uns sind wichtige Beiträge zum Verständnis eines neuartigen Zweiband Mott-Überganges gelungen, das die Physik vieler Übergangsmetalloxide erfasst. Die Elektronen in beiden Bändern interagieren über Coulomb- und Austauschwechselwirkungen. Dieses Modell haben wir mittels der dynamischen Molekularfeld-Methode (DMFT) in Verbindung mit der numerischen Renormierungsgruppenmethode (NRG) behandelt. Die Resultate zeigen einen kontinuierlichen Quantenphasenübergang der Elektronen im weiten Band für Parameterwerte der Wechselwirkung zwischen den Bändern, relevant für typische Übergangsmetalloxide.

#### Von elektronischer Struktur zu magnetischen Phasen

Die Spintronik als Teilgebiet des Magnetismus ist mit über 3.000 Publikationen pro Jahr eines der aktivsten Forschungsgebiete der Kondensierten Materie. Die Suche nach optimalen magnetischen Materialien und der Wunsch nach ultraschnellen Ummagnetisierungsprozessen in Anlehnung an die Fragestellung eines optimal schnellen Schreibens magnetischer Information, sind wesentliche treibende Kräfte in der Grundlagenforschung des Magnetismus.

Ferromagnetische Halbleiter mit Curie-Temperaturen oberhalb der Raumtemperatur konnten bisher nicht realisiert werden. Immerhin konnten nunmehr drei wesentliche Wechselwirkungsmechanismen in verdünnten magnetischen Halbleitern identifiziert werden. Deren Abhängigkeiten von der Konzentration der magnetischen Fremdatome und der Position des Fermi-Niveaus in der Bandlücke konnte durch Analyse der elektronischen Struktur in Form der Zustandsdichte und einfacher Modelle erklärt werden. Dies wird zu einem besseren Verständnis der magnetischen Eigenschaften dieser Halbleiter führen

### Topic 2: Von Materie zu Materialien

Mit der Miniaturisierung technischer Bauelemente und dem wachsenden Bedarf an modernen Materialien wird ein Verständnis ihrer physikalischen Eigenschaften auf der atomaren Skala immer wichtiger. Materialeigenschaften von besonderem Interesse sind hier die Struktur der Materialien, Defekte, charakteristische energetische Parameter sowie komplexe Materialien mit neuen mechanischen, elektrischen oder magnetischen Eigenschaften.

#### Dünne Schichten und Grenzflächen

Technische Entwicklungen beruhen oft auf fundamentalen Materialeigenschaften. Beispiele sind die Wirkung von Platin in Katalysatoren und die Metallglättung in galvanischen Bädern. Beide Prozesse werden energetisch und dynamisch von Nanostrukturen kontrolliert. Wichtige Energieparameter sind hier die Stufenspannung und, bei ungeladenen Oberflächen, die freie Stufenenergie. Es wurde eine Methode vorgestellt, beide Parameter für Metalle im Vakuum bzw. in Elektrolyten zu bestimmen. Für Pt(111) konnten erstmals absolute Werte für die freie Stufenenergie durch Kombination der inversen Wulff-Konstruktion mit Daten zu Inselfluktuationen ermittelt werden. Zudem wurde gezeigt, dass für Ag(001) im Elektrolyten die

Stufenspannung durch die Stufenkapazität und nicht wie bei Au(001) durch das Stufendipolmoment bestimmt wird.

### Mikromechanik von Grenzflächen

Für die Entwicklung von molekularen Bauelementen ist der Einsatz von Rastersondenmethoden zur Untersuchung der atomaren Struktur von großer Bedeutung. In Ab-initio-Rechnungen zur Wechselwirkung adsorbierter Benzols auf Cu(110) mit einer Rastersondenspitze aus Silizium wurde gezeigt, dass abhängig von der Struktur der Spitze das Benzolmolekül lateral auf dem Substrat verschoben wird oder direkt an die Spitze bindet.

Elastische Spannung ist ein wesentliches Element für die Entstehung und Ausbreitung von Rissen, insbesondere im Falle einer Grenzfläche zwischen zwei Materialphasen. Es wurde ein minimales kinetisches Modell zur Beschreibung des Übergang zwischen zwei Phasen unter elastischer Spannung entwickelt, wie man es z.B. bei hexagonal-orthorhombischen Phasenübergängen in Ferroelektrika findet

### Defekte in modernen Materialien

Zum Studium moderner Materialien auf atomarer Skala leisten hochauflösende Elektronenmikroskope mit Sub-Angström-Auflösung, wie sie im Ernst-Ruska Zentrum (ER-C) verwendet werden, wichtige Beiträge. Viele Material-Eigenschaften werden durch Defekte bestimmt. Ein Beispiel ist die Existenz hantelförmiger Verzerrungen entlang von Versetzungen in GaAs(110). Detaillierte Untersuchung mit einer Aberrationskontrolle bis zur 6. Ordnung zeigt, dass diese durch Umordnung von Atomen in der Nähe der Versetzung hervorgerufen werden. Korngrenzen spielen bei der  $\beta$ -Phase von Tantal eine wichtige Rolle, welches als Verbindungsschicht zwischen Kupfer und Keramiken eingesetzt wird. Hier wurden erstmalig  $30^\circ$ -Korngrenzen abgebildet, welche durch atomare Agglomeration beim Wachstum entstehen.

### Komplexe metallische Legierungen

Komplexe metallische Legierungen (CMA) sind Kristalle mit sehr großen Einheitszellen, die eine Materialklasse zwischen kristallin und amorph bilden. Die epsilon-Phasen unter den CMAs enthalten mehrere hundert bis tausend Atome pro Einheitszelle. Metaversetzungen sind kürzlich entdeckte Defekte, die erstmalig eine gute Beschreibung plastischer Deformation in CMAs liefern. Für orthorhombisches Al-Pd-Fe wurde nun ein neuer Typ von Metaversetzungen in xi-Strukturen gefunden, der ein komplementäres Gegenstück in allen  $\beta$ -Phasen mit Phasonlinien als Strukturelement besitzt. Während die Struktur vieler CMAs gut charakterisiert ist, bleiben ihre physikalischen Eigenschaften weiterhin weitgehend unerforscht. Trotz seiner strukturellen Komplexität verhält sich beta-Al<sub>3</sub>Mg<sub>2</sub> in vieler Hinsicht wie ein einfaches Metall, ist bei fehlender Inversionssymmetrie im Volumen jedoch supraleitend.

## **Topic 3: Weiche Materie und Biophysik**

### Mesoskopische Dynamik: Ultralangsame grenzflächennahe Dynamik von Kolloiden

Seit langem gibt es theoretische Voraussagen, dass die Beweglichkeit von kolloidalen Partikeln in unmittelbarer Nähe zu einer Wand eingeschränkt ist. Erst in den letzten 5 Jahren wurden diese Voraussagen für Partikel mit Radien unter 100 nm experimentell verifiziert. In Mischungen aus sphärischen und stäbchenförmigen Kolloiden wird diese Verlangsamung der Kugeldynamik noch drastisch verstärkt. Durch Zugabe von nur 10-3 Volumenprozent stäbchenförmiger Viruspartikel wird der Diffusionskoeffizient von sphärischen Kolloiden in der Nähe der Wand halbiert. Dieser Effekt ist um mehr als eine Größenordnung ausgeprägter, als man durch die Viskositätszunahme der Lösung aufgrund der Viruspartikel und die induzierte attraktive Wechselwirkung zwischen den Kolloiden und der Wand erwartet. Die Ursache für diesen starken Effekt ist vermutlich in der hydrodynamischen Wechselwirkung der Stäbchen zu suchen. Um diese Hypothese zu überprüfen, werden zurzeit umfangreiche Computersimulationen durchgeführt.

### Getriebene Systeme: Hydrodynamische Abschirmung von Polymeren in Scherströmung

Stern-Polymere bestehen aus identischen, linearen Polymeren, die alle an einem Ende mit einem gemeinsamen Zentrum verbunden sind. Stern-Polymere zeigen ein interessantes Verhalten in Scherströmung, das mit zunehmender Funktionalität (Zahl der Arme) von einer Taumelbewegung aus Streckung und Kollaps in eine neuartige, stetig radartige Rotation - ähnlich wie sie bei elastischen

Mikrokapseln beobachtet wird - übergeht. Dabei beeinflussen sich die Polymer-Deformation und das hydrodynamische Strömungsfeld gegenseitig. Dieses Verhalten wurde mittels mesoskopischer Hydrodynamik-Simulationen untersucht. Es zeigt sich, dass das von außen aufgeprägte Strömungsfeld innerhalb des Stern-Polymers mit zunehmender Funktionalität immer stärker abgeschirmt wird. Dies hat einen großen Einfluss auf den Orientierungswinkel der Deformationsachse des Polymers relativ zur Strömungsrichtung, wie ein Vergleich mit Simulationen ohne Hydrodynamik zeigt.

#### Biologie-inspirierte Physik und Biophysik: Glasartige Dynamik von Aktin-Netzwerken

Mechanische Funktionen lebender Zellen, wie Zell-Adhäsion, Kontraktion oder Fortbewegung, sind von sehr großer physiologischer und pathologischer Bedeutung. Überraschenderweise zeigten experimentelle Untersuchungen, dass lebende Zellen glasartige mechanische Eigenschaften besitzen. Allerdings ist es aufgrund der extrem vielen aktiven Prozesse, die in lebenden Zellen simultan ablaufen, praktisch unmöglich, die diesen Eigenschaften zugrunde liegenden Prinzipien zu studieren. Da das Protein Aktin in seiner polymerisierten Form die mechanischen Eigenschaften lebender Zellen dominiert, untersuchten wir polymerisierte Lösungen dieses Proteins. Hierbei fanden wir auf längeren Zeitskalen ebenfalls deutlich glasartiges Verhalten. Damit wurde eindeutig gezeigt, dass glasartige Eigenschaften bereits auf der Ebene der Polymernetzwerke innerhalb der Zelle auftreten. Dieser Befund unterstreicht die Bedeutung von Prinzipien der weichen Materie für lebende Organismen.

#### Biologie-inspirierte Physik und Biophysik: Struktur und Funktion von Biomolekülen

Ein Paradigma der Biologie betrifft den Zusammenhang von Struktur und Funktion eines Biomoleküls. Obwohl dynamische Aspekte häufig einen wichtigen Beitrag zum "Funktionieren" eines Proteins leisten, wurde diese funktionelle Dynamik bisher viel weniger betrachtet. Mit Hilfe der Neutronen-Spinecho-Spektroskopie haben wir gezeigt, dass es möglich ist, die kooperative Dynamik der Domänen eines Biomoleküls direkt zu beobachten. Dies geschieht über die Messung des kohärenten Formfaktors des entsprechenden Bewegungsmusters. Im Falle der Alkohol-Dehydrogenase wurde so eine funktionelle Mode, die die Öffnung des Schlitzes zwischen der katalytischen Domäne und der Bindungsdomäne bewirkt, direkt beobachtet. Das Öffnen dieses Schlitzes ermöglicht den Einbau des für die enzymatische Funktion wesentlichen Co-Faktors NAD. Damit eröffnet sich die Möglichkeit, in den thermischen Fluktuationen von Biomolekülen Moden zu finden, die für den Funktionsablauf von Bedeutung sind.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

#### Veranstaltungen

- 2007 wurde die methodisch orientierte 38-ste IFF-Ferientschule mit dem Titel "Probing the Nanoworld - Microscopies, Scattering and Spectroscopies of the Solid State" abgehalten. Sie zog 220 Student(inn)en aus 22 Ländern an.
- Die traditionelle Neutronenschule mit Vorlesungen am FZJ und Experimenten am FRM II wurde auch 2007 fortgesetzt.
- Im Oktober 2007 veranstalteten die Soft-Matter-Institute des IFF die erste Internationale Soft Matter Konferenz in Aachen. Sie war ein großer Erfolg und brachte mehr als 600 Wissenschaftler aus der ganzen Welt nach Aachen.

#### Nachwuchsförderung

- Eine HGF-Nachwuchsgruppe für den Bereich Molekulare Elektronik (Dr. M.R. Wegewijs) wurde erfolgreich eingeworben. Er hat im April 2007 die Arbeit aufgenommen.
- Ein weitere Nachwuchsgruppe wurde im Tenure-Track-Programm zur Förderung von Wissenschaftlerinnen an Frau Dr. Marisol Ripoll, IFF, für das Thema "Thermal diffusion of complex fluids using mesoscopic hydrodynamic simulations" vergeben.
- Prof. Dr. Paul Kögerler hat im ersten Jahr seiner Tätigkeit am Institut für Anorganische Chemie der RWTH Aachen und gleichzeitig am IFF eine neue Forschungsgruppe "Molekularer Magnetismus" etabliert. Im IFF wurde dazu neue Laborinfrastruktur für chemische Synthese und chemisch-physikalische Charakterisierungsmethoden fertiggestellt.
- Prof. Dr. Eva Pavarini hat inzwischen das Angebot auf eine W2-Professur am Forschungszentrum Jülich verbunden mit der RWTH-Aachen für den Bereich "Theoretische Physik stark korrelierter Elektronen-Systeme" erhalten.

## Preise / Auszeichnungen / Berufungen

Im Berichtsjahr wurden wieder mehrere Wissenschaftler durch hochrangige Preise ausgezeichnet:

- Prof. Peter Grünberg, IFF, wurde für seine Entdeckung des Riesenmagnetowiderstands (GMR) am IFF mit dem Nobelpreis für Physik des Jahres 2007 ausgezeichnet. Er erhielt den Preis zusammen mit seinem französischen Kollegen, Prof. Albert Fert.
- Prof. Peter Grünberg erhielt im Jahr 2007 weiterhin:
  - die Stern-Gerlach Medaille, höchste Auszeichnung für Experimentalphysik der Deutschen Physikalischen Gesellschaft;
  - den Wolf-Preis für Physik der Wolf-Foundation, Israel;
  - den Japan-Preis, aus der Hand des japanischen Kaisers;
  - die erste Helmholtz-Professur, verliehen in Bonn;
  - die Ehrendoktorwürde der RWTH-Aachen.
- Prof. Takao Ohta, Kyoto, erhielt den Humboldt-Forschungspreis für einen Gastaufenthalt im IFF.
- Dr. rer. nat. Sergiy Balanetsky erhielt den Preis der Nationalakademie der Wissenschaft der Ukraine für Junge Wissenschaftler.
- Prof. Rainer Waser erhielt den "Ikeda Award" in Kyoto, Japan.
- Frau Sabrina Disch erhielt ein Promotionsstipendium der Studienstiftung des deutschen Volkes.
- Dr. Hiroshi Noguchi erhielt den JDZB-Wissenschaftspreis des Japanisch-Deutschen Zentrums Berlin.
- Dr. J. Elgeti erhielt den Günter-Leibfried-Preis 2007.
- Frau Dr. Marjana Lezaic setzte sich mit ihrem Antrag für eine Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe durch.
- Dr. Raphael P. Hermann setzte sich mit seinem Antrag für eine Helmholtz-Hochschul-Nachwuchsgruppe durch.
- Prof. Jan Dhont erhielt eine Gastprofessur an der Katholieke Universiteit Nijmegen 2006, sowie in FORTH, Heraklion, 2007.
- Prof. Dieter Richter wurde in das Scientific Advisory Committee von NanoGUNE der Nanotechnologie Initiative des Baskenlandes berufen.
- Prof. Heiner Müller-Krumbhaar wurde in das Strategiekomitee für Höchstleistungsrechnen der französischen Regierung (CSCI) berufen
- Prof. Thomas Brückel wurde zum Vice Chairman des Instrument Advisory Committee am Laboratoire Leo Brillouin LLB ernannt.
- Das IFF des FZJ ist - wie schon seit einiger Zeit das IFP des FZK - Mitglied des angesehenen Institute of Complex Adaptive Matter (ICAM), das von der University of California organisiert wird.

## Drittmittelprojekte

Im Transregio SFB "Colloids in External Fields" werden mehrere Projekte des IFF gefördert. Prof. C.M. Schneider leitet ferner ein Projekt im Rahmen des SFB 491 "Magnetische Heterostrukturen" (Bochum-Duisburg-Essen) und ein BMBF-gefördertes Kooperationsprojekt (mit U Kaiserslautern, FU Berlin, BESSY) zur Weiterentwicklung der zeitaufgelösten Photoemissionsmikroskopie.

Beim DFG-Projekt "Physical Properties of Complex Metallic Alloys" (Volumen ca. 1 Mio Euro) ist FZJ federführend. Projektpartner sind die Universitäten Göttingen, Stuttgart und Frankfurt

Für die Neutronenstreuung waren neben der DFG Quellen: die Bundesumweltstiftung (New cleaning agents on the basis of microemulsions for offset printing), das BMBF (Bau eines Rückstreuспекrometers hohen Flusses unter Einsatz eines Phasentransformationschoppers am FRM II), die EU mit mehreren Projekten (Soft Matter Composites - An approach to nanoscale functional materials; NMI 3 Transnational Access; NMI 3 Correction devices for highest magnetic precession fields; SANS micropore films)

Im Projekt "SoftComp" (EU) beispielsweise sind folgende Institutionen zusammen geschlossen: Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf, Universität Göttingen, Universität zu Köln, Utrecht University, University of Twente, University of Leeds, The University Court of the University of Edinburgh, University of Oxford, Katholieke Universiteit Leuven, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut Curie, Universidade de Vigo, Universidad del Pais Vasco, Risoe National Laboratory, Weizmann Institute of Science, Foundation for Research and Technology - Hellas, A. Mickiewics University, DOW Benelux B.V.,

Schlumberger Cambridge Research Limited, Unilever, BASF AG, RHODIA Services, Johannes-Gutenberg Universität Mainz.

Im Projekt (DFG) "Prinzipien der Biomineralisation" beispielsweise kooperieren folgende Institutionen: Johannes-Gutenberg Universität Mainz, Institut für Anorganische und Analytische Chemie, RWTH Aachen, IZKF BIOMAT, MPI für Kolloid- und Grenzflächenforschung Golm, Potsdam, Universität Duisburg-Essen, Institut für Anorganische Chemie, Universität Bremen, Institut für Biophysik. Verlängert für 2 Jahre wurde das Projekt im DFG-Schwerpunktprogramm "Nano- und Mikrofluidik: Von der molekularen Bewegung zur kontinuierlichen Strömung". Titel des Projekts: "Flow behavior of soft objects like polymers, vesicles and cells in micro-channels".

Neu bewilligt für 4 Jahre wurde das EU Collaborative Research Project FP7-NMP4 "Toolbox for Directed and Controlled Self-Assembly of Nano-Colloids (NanoDirect)". Partner: Utrecht (NL), FORTH (Greece), Twente (NL), Vigo (Spain).

Neu bewilligt wurde für 4 Jahre das EU Collaborative Research Project FP7/NMP4 "Multi Scale Modelling of Nanostructured Polymeric Materials: From Chemistry to Materials Performance (nanomodel)". Partner: BASF AG, TU Darmstadt, TU Athen, TU Erlangen, Gritche Technologies Inc., FZJ, CULGI B.V., Fiat/CRPO, Universität Freiburg, Universität Triest, Robert Bosch GmbH.

Der Zugang zu den Neutroneninstrumenten des JCNS wird durch das Access-Programm NMI3 der EU gefördert. Dieses Projekt unterstützt auch Forschungsarbeiten zur Neutronenpolarisation sowie zur Herstellung von polarisiertem Helium He3.

Aus dem Bereich der Verbundforschung wurde der Bau des Rückstreuспекtrometers Spheres am FRM II sowie der Betrieb des Dreiaxieninstruments IN12 am ILL unterstützt.

Als neues Verbundprojekt wurde der Bau des Flugzeitpulverdiffraktometers POWTEX am FRM II gemeinsam mit der RWTH Aachen finanziert.

Ein Projekt zu mikroporösen Filmen wurde aus dem Marie-Curie-Programm der EU finanziert. Aus DFG und GIF werden mehrere Projekte zur Rissausbreitung finanziert.

Der Senat der HGF hat einer gebäude- und gerätetechnischen Erweiterung des Ernst-Ruska-Zentrums (ER-C) (Gesamtvolumen 5,3 Mio  $\square$ ) zugestimmt. Das Bauvorhaben für die Errichtung eines neuen Laborgebäudes ist angelaufen (geplanter Abschluß im Sommer 2009); die zusätzlich beschafften Elektronenmikroskope, Spektrometer und präparativen Einrichtungen stehen seit dem Jahreswechsel 2007 auf 2008 für den Nutzerbetrieb zur Verfügung.

Das Jahr 2007 war zugleich das erste Jahr des "normalen" Nutzerbetriebs des ER-C. Vermittelt einer Verdoppelung der an den beiden Titan 80-300 Mikroskopen bearbeiteten Nutzerprojekte gegenüber 2006 wurden externe Auslastungsquoten an den beiden Spitzengeräten des ER-C von 47% bzw. 52% erreicht.

Das FZJ beteiligte sich auch im Jahr 2007 federführend an dem HGF-Projekt "Deutsches Zentrum für Mikroskopie und Spektroskopie mit Elektronen". Projektpartner ist die RWTH Aachen.

Im Rahmen eines über zwei Jahre angelegten Projekts "Precise Measurement of Optical Aberrations for Sub-Ångström Imaging in Scanning Transmission Electron Microscopy" mit der Firma FEI (vormals Philips Electron Optics, Eindhoven) ist das ER-C federführend an der Entwicklung numerischer Verfahren zur höchstpräzisen Messung und Korrektur elektronenoptischer Restaberrationen in aberrationsoptimierten Mikroskopen der neuesten Gerätegeneration beteiligt.

Bewilligung einer DFG-Forschergruppe "Quantum Phase Transitions" zusammen mit den Universitäten Augsburg, Göttingen, Köln, Karlsruhe und München sowie des MPI für chemische Physik fester Stoffe Dresden (unter Federführung von Prof. Dr. Hilbert v. Löhneysen, Karlsruhe).

#### Ungebundene Forschung

Im Rahmen der Exzellenz-Initiative für die deutschen Universitäten wurde zwischen der RWTH-Aachen und dem FZJ die Jülich Aachen Research Alliance (JARA) gegründet, mit zunächst drei Sektionen: JARA-BRAIN

(Hirnforschung), JARA-FIT (Fundamental Research for Information Technology) und JARA-SIM (Computer Simulation in Science and Engineering). Eine vierte Sektion JARA-ENERGY befindet sich im Aufbau.

Am 30. Oktober 2007 wurde die German Research School for Simulation Sciences GmbH (GRS) gemeinsam vom FZJ und der RWTH-Aachen gegründet. Die GRS wird, zunächst auf 5 Jahre, zu gleichen Teilen vom BMBF, dem MIWFT-NRW, der Helmholtz-Gemeinschaft, der RWTH und dem FZJ finanziert. Prof. H. Müller-Krumbhaar wurde zusammen mit M. Nettekoven, Kanzler der RWTH, zum Geschäftsführer bestellt.

## Weitere Programmentwicklung

### A) Strukturelle Aspekte

Ein Rahmen für zukünftige Struktur und Entwicklung der Forschung im FZJ wurde vor drei Jahren in Form des Struktur- und Entwicklungsplans für die kommenden zwei Dekaden vorgestellt. In der Zwischenzeit hat sich die Leitungsstruktur des Forschungszentrums Jülich geändert und Jülich hat eine neue Geschäftsführung. Jülich wird seinen Schwerpunkt im Bereich der Forschung für zukünftige Schlüsseltechnologien verstärken, aufbauend auf seine umfangreiche Expertise in Physik, Nano- und Biotechnologie. Andere Forschungsfelder, die durch das gegenwärtige Programm teilweise berührt werden, betreffen Hirnforschung und Forschung im Energie- und Umweltbereich. Entsprechend wird 2008 ein aktueller Struktur- und Entwicklungsplan vorgelegt.

Drei Aspekte sind von besonderer Bedeutung für die Entwicklung des Programms in den folgenden Jahren:

- Für die nächste HGF-Periode der Finanzierung 2010-2014 ist geplant, die Forschungsaktivitäten dieses HGF-Programms aus dem Forschungsbereich Struktur der Materie in den Forschungsbereich Schlüsseltechnologien zu überführen. Hiermit folgen wir der Empfehlung des HGF-Senats, die Verbindung zum Programm Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen zu verstärken. Ein neuer Topic über grundlegende physikalische Phänomene und Methoden innerhalb des neuen Programms wird daher die gegenwärtigen Aktivitäten zu elektronischen und magnetischen Eigenschaften des Programms Kondensierte Materie einbringen. Hierzu gehört ebenfalls die Untersuchung starker elektronischer Korrelationen im Hinblick auf die Eigenschaften elektronisch aktiver Materialien. Dieses Vorhaben wird zusätzlich unterstützt werden durch die neuformierte Jülich-Aachen-Research Allianz (JARA) mit ihrem Fokus auf experimentelle und theoretische Forschung zu Grundlagen zukünftiger Informationstechnologie.
- Die beobachtbare Konvergenz von molekularer Biologie mit der Physik Kondensierter Materie legt es nahe, Kräfte am Forschungszentrum Jülich zu bündeln, um Forschung im Bereich von Biophysik und Weicher Materie innerhalb des gleichen HGF-Programms zusammenzufassen. Es ist geplant hierzu Forschungsgruppen aus dem Jülicher Institut für Neurowissenschaften und Biophysik (INB-1 und INB-2) in ein neues Programm BioSoft zu integrieren, welches diese Gruppen mit ihrer Expertise in Zellbiologie und struktureller Biologie stärken werden. Eine Spezialität dieser Gruppe sind die NMR-Instrumente für molekulare Untersuchungen und das Know-how in Proteinkristallographie, welches den Neutronen- und Synchrotronmöglichkeiten der jetzigen Mitglieder des Kondensierten Materie Programms perfekt ergänzen, beispielsweise im Jülich Center for Neutron Science (JCNS). Arbeitsgruppen mit Spezialerfahrung in Signalausbreitung und Ionenkanälen in Zellen werden die Verbindung zur Bioelektronik verstärken, welche schon jetzt im Programm "Informationstechnologie mit Nanoelektronischen Systemen" angesiedelt ist. Die neuinstallierte International Helmholtz Research School for Biophysics and Softmatter ist bereits in Aktion.
- Jülich hat sich inzwischen zu einem der weltweit führenden Supercomputer-Zentren entwickelt. Auf diesem Weg weiter voranschreitend wird die Zusammenarbeit zwischen IFF und IBN mit dem Programm "Scientific Computing" weiter ausgebaut.

### B) Personelle Aspekte

Die Nachfolge von Prof. H. Ibach und Prof. H. Lüth als Direktoren von IBN-3 und IBN-1 wurde jeweils abgeschlossen durch neuberufene Direktoren, Herrn Prof. D. Grützmacher und Prof. S. Tautz. Wegen der zukünftigen Neuorientierung in der nächsten Antragsperiode sind hier auch die Aktivitäten zum Programm "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen" angesprochen:

- Prof. D. Grützmacher am IBN-1 hat zwei neue Vorhaben auf den Weg gebracht, um die Forschungsaktivitäten innerhalb des Programms Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen zu stärken. Das HOT-GaN-Projekt befasst sich mit der Integration eines Hochenergie-Hochfrequenzoszillators mit nanoelektronischer Frequenzmultiplikation zur Erzeugung von Teraherzschwingungen. Das WQUIT-Projekt befasst sich mit der Untersuchung von Nanodrähten für Quanteninformationstechnologie. Insbesondere indiumreiche Halbleiter wie InAs, InN und auch InSb werden untersucht um Modellsysteme zu identifizieren, die Einzelelektronenphänomene und Spinmanipulation ermöglichen. Die Einrichtung von CVD- und MBE-Systeme für die Epitaxie von SiGe-Nanostrukturen soll die Herstellung von siliziumbasierenden Quantendrähten und Quantenpunktstrukturen erlauben und zu einem verstärkten Überlapp von Silizium- und III/V-Technologie führen. Zu diesem Zweck ist auch die Integration optoelektronischer Komponenten auf Silizium geplant.
- Prof. S. Tautz: Seine Forschung wird sich auf das dynamisch in Entwicklung befindliche Feld molekularer Nanowissenschaften konzentrieren, an der Grenze zwischen Physik, Chemie, Biologie und Ingenieurwissenschaften. Die Untersuchung von Eigenschaften zur Strukturelektronik und Ladungstransport von Hybridsystemen, die aus Molekülen und inorganischen Nanostrukturen zusammengesetzt sind, stellt eine besondere Herausforderung dar. Hierbei will er sich insbesondere um Selbstorganisationsprozesse dieser Materialien zur direkten Ausbildung von Nanostrukturen an Oberflächen kümmern. Das Studium solcher organisch-anorganischen Hybridstrukturen wird eine wesentliche Grundlage für Anwendungen in der Molekularen Nanoelektronik, die neue Optionen für zukünftiges Hochleistungsrechnen bieten kann.

### **C) Forschungsthemen im kommenden Jahr**

Einige Beispiele für Weiterentwicklungen der Forschungsthemen werden nachfolgend angeführt.

#### **Topic 1: Elektronische und magnetische Phänomene**

Experimentelle Untersuchungen der Magnetisierungs- und Spindynamik mit höherer Zeitauflösung und zusätzlichen Anregungsmechanismen (spinpolarisierte Ströme, Photonen).

Engere Verzahnung von Experiment-Simulation im Bereich der Magnetodynamik.

Erweiterung der elektronenspektroskopischen Untersuchungen in Richtung elektronischer Korrelationseffekte und Untersuchung der elektronischen Ursachen magnetokristalliner Anisotropien. Erste strukturelle und elektronische Untersuchungen an Mono-Schichten molekularer Magnete auf magnetischen Substraten.

#### **Topic 2: Von Materie zu Materialien**

Die mikroskopisch grundlegenden Arbeiten zur hochpräzisen Messung und Korrektur elektronenoptischer Restaberrationen für die höchstauflösende (HRTEM) sowie die Rastertransmissionselektronenmikroskopie (STEM) werden im Jahr 2008 intensiviert vorangetrieben. Eine Lizenzierung der am ER-C entwickelten Programmpakete an die Firma FEI steht kurz bevor. Im Anwendungsbereich ist eine verstärkte Nutzung dieser numerischen Verfahren zur Bestimmung der strukturellen und elektronischen Eigenschaften nanoskaliger Systeme und komplexer metallischer Verbindungen geplant.

Darüber hinaus wird die gesamte am ER-C vorgehaltene experimentelle und numerische Analytik in den praktischen Nutzerbetrieb des Centrums einfließen. Damit gewinnt die Vielseitigkeit der am ER-C entwickelten Verfahren eine zusätzliche Qualität, die auch externen Nutzern zur Verfügung stehen wird.

#### **Topic 3: Weiche Materie und Biophysik**

Die Erweiterung der Programmatik im Bereich Polymerdynamik hin zu "random systems" wird durch Arbeiten an mit Nanoteilchen gefüllten Polymerschmelzen fortgesetzt. In derartigen Systemen kann der Effekt einer Zufallsumgebung systematisch angegangen werden und gleichzeitig der anomale inverse Viskositätseffekt der Nanoteilchen auf seine mikroskopische Ursache hin untersucht werden. Die geplanten Forschungsarbeiten werden in das EU-FP7 Projekt "Nanomodel" mit BASF als Konsortialführer eingebettet. Die Kinetik der Mizellbildung aus amphiphilen Blockcopolymeren auf dem Weg vom Unimer zur Mizelle hin zur Gleichgewichtsverteilung der Mizellgrößen und Formen in Abhängigkeit externer Kontrollgrößen wird untersucht. Dabei soll auch das "Altern" von Nichtgleichgewichtsstrukturen von Gelen und Gläsern, die sich in konzentrierter mizellarer Lösung bilden, betrachtet werden. Die Rolle verschiedener Schritte der Aggregation und des Mizellaufbaus wird durch zeitabhängige Streuexperimente in Kombination mit Modellrechnungen bestimmt.

Neutronenkleinwinkelstreuexperimente (SANS) an Kalziumprotein-Teilchen (KPT) haben den Inhibitionsmechanismus der Kalzifikation durch das Protein Fetuin-A aufgeklärt. Kürzlich wurden mit SANS derartige KPTs im Blut von Dialysepatienten entdeckt, die als kalzifizierungsanfällig gelten, da sie reduzierte Fetuin-A-Niveaus aufweisen. Diese Forschungsergebnisse haben eine Brücke von der Neutronenstreuung (Physik) zur Medizin geschlagen, deren Tragfähigkeit in Zukunft erkundet werden soll.

---

[Detailergebnisse](#)

[Publikationen](#)

[Patente](#)

---

# Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen

HGF - Forschungsbereich / **Programm** / Programmthema, -themen

- 5 Struktur der Materie
- **5.5 Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen**
- 5.5.2 Neutronen

**Beteiligte Institute:** [IFF](#), [ZAT](#), [ZEL](#), [ZFR](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Thomas Brückel, IFF, [t.brueckel@fz-juelich.de](mailto:t.brueckel@fz-juelich.de)

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
- 

## Highlight

Das "Jülich Centre for Neutron Science" JCNS betreibt unter einheitlicher wissenschaftlicher Zielsetzung Instrumente an nationalen und internationalen Spitzenquellen und bietet dem externen Nutzer den Zugang zu Experimenten mit Neutronen an der jeweils optimal ausgerüsteten Quelle unter identischen Randbedingungen. Bereits im Jahr nach Abschaltung des FRJ 2 wurden wesentliche Meilensteine beim Aufbau der Außenstelle am FRM II in Garching erreicht: das JCNS-Büro- und -Laborgebäude wurde bezogen; der Aufbau der Mannschaft vor Ort ist fast abgeschlossen; das JCNS-Nutzerbüro hat seine Tätigkeit aufgenommen; es wurden Labors in den Kernbereichen der Jülicher Expertise "Weiche Materie und Biophysik" und "Nanomagnetismus und hochkorrelierte Elektronensysteme", eingerichtet. Damit bietet JCNS auch am FRM II externen Nutzern neben exzellenten Neutronenstreuinstrumenten ein hochkarätiges wissenschaftliches Umfeld mit einschlägigen Labormethoden und Expertenwissen. Nach Umzug von sechs Instrumenten befinden sich insgesamt sieben JCNS Instrumente am FRM II, wobei jedes Instrument wesentlich verbessert wurde. So verzeichnet das Spinechospektrometer einen Flussgewinn von einem Faktor 15 und die Kleinwinkelanlage KWS-2 erreicht bis auf 30 % den Fluss der weltbesten Anlage D22 am ILL. Nur ein Jahr nach Abschaltung des FRJ-2 lief der Nutzerbetrieb an 8 Instrumenten an den Außenstellen am FRM II, am ILL und an der SNS wieder an. Das traditionelle Neutronenpraktikum konnte lückenlos auch 2007 fortgeführt werden. Für die Zukunft strebt das JCNS eine Kooperation mit der TU München an mit dem Ziel, den wissenschaftlichen Nutzerbetrieb an der Forschungsneutronenquelle "Heinz Maier-Leibnitz" entsprechend ihres Potentials als nationale Aufgabe gemeinsam zu gestalten.

## Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im Forschungsbereich Struktur der Materie kommen eine Vielzahl von Großgeräten zum Einsatz, die Forschungsmöglichkeiten mit Photonen, Neutronen und Ionen für eine breite Palette von Wissenschaftsdisziplinen, angefangen von Physik, Chemie, Biologie und Geowissenschaften, bis hin zu Materialwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Umweltforschung bieten. Der größte Teil der an diesen Großgeräten verfügbaren Strahlzeit wird externen Nutzern zur Verfügung gestellt, die hauptsächlich von Universitäten, aber auch von außeruniversitären Forschungseinrichtungen und der Industrie, kommen.

Das Forschungszentrum Jülich ist im Bereich der Forschung mit Neutronen aktiv. Dabei resultiert die spezielle Rolle Jülichs innerhalb der deutschen Neutronenlandschaft aus:

- einer leistungsstarken Eigenforschung auf dem Gebiet kondensierter Materie mit Schwerpunkten in den Bereichen "Weiche Materie und Biophysik" und "Nanomagnetismus und hochkorrelierte Elektronensysteme";
- einem Nutzerbetrieb, der in diesen wissenschaftlichen Schwerpunktbereichen Unterstützung durch Experten und Laboreinrichtungen bietet;
- einem wissenschaftsmotivierten Methoden- und Instrumententwicklungsprogramm;
- der Nutzung der zukunftsweisenden Möglichkeiten der Neutronenforschung an gepulsten MW-Spallationsquellen.

Die Jülicher Arbeiten sind in das Helmholtz-Programm "Großgeräteforschung mit Photonen, Neutronen und Ionen" PNI eingebunden, das formal im Jahr 2005 begonnen hat. Forschung mit Neutronen ist zugleich ein Grundpfeiler des Programms "Kondensierte Materie" und liefert wichtige Beiträge auch in anderen Programmen, z. B. "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen".

Seit Mai 2006 betreibt das Forschungszentrum Jülich keine eigene Neutronenquelle mehr. Stattdessen wurde eine für die HGF völlig neue Struktur geschaffen: das Jülich Centre for Neutron Science JCNS, das unter einheitlicher wissenschaftlicher Zielsetzung Instrumente an verschiedenen Spitzenquellen betreibt. Das JCNS umfasst die Eigenforschung mit Neutronen, die Instrument- und Methodenentwicklung, sowie den Instrumentbetrieb mit zugehörigem Nutzerprogramm an den modernsten und leistungsfähigsten Quellen weltweit: an der nationalen Spitzenquelle FRM II in München, am weltweit flussstärksten Forschungsreaktor des ILL in Grenoble und an der ersten Neutronenquelle der nächsten Generation, der MW-Spallationsquelle SNS in Oak Ridge, USA. Während sich das JCNS z. Zt. noch im Aufbau befindet, wird es mittelfristig vom Umfang her einer Neutronenstreuereinrichtung an einem Mittelflussreaktor entsprechen, nur dass die Instrumente des JCNS an der für die jeweilige Anwendung besten Quelle stehen werden. Damit bietet das JCNS dem externen Nutzer den Zugang zu Experimenten mit Neutronen an der jeweils optimal ausgerüsteten Neutronenquelle unter einheitlichen Randbedingungen.

Für die Zukunft strebt das JCNS eine Kooperation mit der TU München an mit dem Ziel, den wissenschaftlichen Nutzerbetrieb an der Forschungsneutronenquelle Heinz Maier-Leibnitz entsprechend ihres Potentials als nationale Aufgabe gemeinsam zu gestalten.

## Programmergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

Die an den Neutroneninstrumenten des Forschungszentrum Jülich durchgeführte Eigenforschung ist wesentlicher Bestandteil des HGF-Programms "Kondensierte Materie", siehe den entsprechenden Fortschrittsbericht. Schwerpunkte liegen in den Themenbereichen "Elektronische und magnetische Phänomene" und "Weiche Materie und Biophysik". Die strategische gegenseitige Verzahnung der beiden Programme "Kondensierte Materie" und "PNI" führt zu einer von der Wissenschaft getriebenen Methoden- und Instrumententwicklung. Dadurch werden auch neue Möglichkeiten für andere HGF-Programme bereitgestellt, etwa für das Programm "Informationstechnik mit nanoelektronischen Systemen" im Forschungsbereich "Schlüsseltechnologien".

Der Forschungsreaktor FRJ-2 wurde am 02. Mai 2006 endgültig abgeschaltet. In der anschließenden Nachbetriebsphase von ca. 2,5 Jahren werden alle Abbauarbeiten vorgenommen, die im Rahmen der Betriebsgenehmigung durchgeführt werden können. In wissenschaftlicher Hinsicht ist hier vor allem der Abbau der Experimentiereinrichtungen zu nennen, die am Münchner Forschungsreaktor FRM II im neu gegründeten "Jülich Centre for Neutron Science (JCNS)" wieder aufgebaut werden bzw. die zu entsorgen sind. Die gesamte Reaktoranlage wurde für die Stilllegung vorbereitet. Parallel dazu werden alle Unterlagen erstellt, die zur Beantragung der Stilllegungs- und Abbaugenehmigung des FRJ-2 erforderlich sind. Es wird erwartet, dass im Rahmen der ersten PoF-Periode bis Ende 2009 die genannte Genehmigung noch erteilt wird und der eigentliche Abbau der Reaktoranlage beginnen kann.

Im Jahr 2007 lagen die Schwerpunkte der Arbeiten des JCNS im Aufbau der Außenstellen am FRM II in Garching und an der amerikanischen MW-Spallationsquelle SNS in Oak Ridge.

Anfang 2007 konnte das JCNS-Büro- und -Laborgebäude auf dem Gelände des FRM II in Garching bezogen werden. Acht Labore wurden eingerichtet, darunter spezialisierte Labore für Chemie, Biologie und Dünnschichten. Damit folgt das JCNS seinem Grundkonzept, den Nutzern nicht nur Neutronen, sondern in seinen Hauptkompetenzgebieten "Weiche Materie und Biophysik" und "Nanomagnetismus und hochkorrelierte Elektronensysteme", auch ein hochkarätiges wissenschaftliches Umfeld mit einschlägigen Labormethoden und Expertenwissen anzubieten. Die wissenschaftliche Anbindung der Außenstellen an das Forschungszentrum Jülich wird durch Videokonferenzanlagen in den Seminarräumen massiv unterstützt. Somit werden gemeinsame wissenschaftliche Seminare und Arbeitsbesprechungen zwischen den JCNS-Gruppen an den Außenstellen und am Mutterinstitut in Jülich ermöglicht.

Auch das Nutzerbüro des JCNS fand in dem JCNS-Gebäude in Garching eine neue Heimat. Es organisiert den Nutzerbetrieb für alle JCNS-Außenstellen. Eine einheitliche Internetseite [www.jcns.de](http://www.jcns.de) bietet dem Nutzer alle für ein geplantes Experiment relevanten Informationen und erlaubt die Antragstellung für Experimente an allen JCNS-Instrumenten, unabhängig von der jeweiligen Neutronenquelle. Messzeitanträge werden von einem international besetzten, unabhängigen Gutachtergremium rein nach wissenschaftlichen Kriterien bewertet.

Der Umzug der Instrumente vom Forschungsreaktor FRJ-2 an den FRM II konnte 2007 fast zum Abschluss gebracht werden. Nur durch unvorhersehbare Verzögerungen im Zusammenhang mit den Genehmigungsverfahren für die Erweiterung der Neutronenleithalle konnten die beiden Kleinwinkelanlagen KWS-1 und KWS-2 nicht in voller Länge aufgebaut werden. Sieben Instrumente befinden sich vor Ort in Garching: das Neutronenspinechospektrometer NSE, die Kleinwinkelanlagen KWS-1, KWS-2 und KWS-3, das Reflektometer TREFF, das RückstreuSpektrometer SPHERES und das kalte Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse DNS. Parallel werden zwei weitere Instrumente, das Reflektometer MARIA und das thermische Flugzeitspektrometer TOPAS, völlig neu gebaut, da ein Umzug der entsprechenden Geräte aus Jülich unpraktikabel ist. Nur durch einen gemeinsamen Kraftakt des Instituts für Festkörperforschung IFF und der wissenschaftlich-technischen Infrastruktur des Forschungszentrums Jülich (Zentralabteilung für Technologie ZAT, Zentralinstitut für Elektronik ZEL und Betriebsdirektion B) konnten der Umzug und die damit verbundenen Änderungen an den Instrumenten in so kurzer Zeit realisiert werden. An allen Instrumenten waren wesentliche Umbauarbeiten nötig, um sie an die gegebenen Platzverhältnisse anzupassen. Zum Teil musste das JCNS sogar Anpassungsarbeiten an Instrumenten durchführen, die bereits vor Ort durch andere Gruppen betrieben wurden. Die zu den Instrumenten gehörige Infrastruktur, wie Messkabinen, Medienanschlüsse, Krane, Zugangs- und Fluchtwege mit Überführungen, musste geschaffen werden. Ein neues Neutronenleitersystem wurde entworfen und gebaut. Die Abschirmungen wurden entsprechend dem höheren Fluss des Münchner Reaktors wesentlich verstärkt. Die Ansteuer- und Sicherheitselektronik wurde auf Jülich-Münchner Standard abgeglichen. Und nicht zuletzt wurden die Instrumente auf den neuesten Stand von Wissenschaft und Technik gebracht, insbesondere was die Erneuerung neutronenoptischer Elemente, Detektoren etc. betrifft - siehe Detailbeschreibungen.

Nur ein Jahr nach Abschaltung des FRJ-2 lief der Nutzerbetrieb zumindest in eingeschränktem Umfang wieder an. In zwei Antragsrunden konnte das JCNS im Jahr 2007 den Nutzern bereits Messzeit an 8 Instrumenten anbieten:

- am Neutronenspinechospektrometer NSE, an den Kleinwinkelanlagen KWS-2 und KWS-3 und am RückstreuSpektrometer SPHERES der JCNS-Außenstelle am FRM II;
- am kalten Dreiachsspektrometer IN12 und - in Kollaboration mit dem CEA Grenoble - am thermischen Dreiachsspektrometer IN22, sowie am Diffraktometer mit schwenkbarem Detektor D23 der JCNS-Außenstelle am ILL;
- am RückstreuSpektrometer BASIS der JCNS-Außenstelle an der SNS.

Im Jahr 2007 wurden innerhalb des Instrumententwicklungsprogramms folgende Ziele erreicht:

#### Neutronenspinechospektrometer NSE am FRM II:

Der Umzug des Neutronenspinechospektrometers NSE wurde 2007 im Wesentlichen abgeschlossen. Polarisierete Neutronen werden durch ein neues Neutronenleitersystem mit  $m=3$ -FeSi-Superspiegeln und einem Zusatzpolarisator für lange Wellenlängen bereitgestellt. Flussmessungen mit Hilfe von Goldfolienaktivierung ergeben in Übereinstimmung mit den Monte-Carlo-Simulationen einen Neutronenfluss von 10 Millionen Neutronen pro Quadratzentimeter und Sekunde bei einer Wellenlänge von 0,7 nm und 10 % Bandbreite. Der Fluss an der Probe ist damit etwa 15 mal höher als an der ehemaligen Position am FRJ-2. Mit Hilfe des Geschwindigkeitsselektors lässt sich eine Wellenlänge zwischen 0,45 nm und 1,9 nm

einstellen, was einen enormen Gewinn an dynamischem Bereich bedeutet. Während der Neutronenfluss bei 0,7 nm dem des Instruments IN15 am ILL entspricht, fällt der Fluss am FRM II aufgrund der untermoderierten kalten Quelle mit zunehmender Wellenlänge stärker ab. Nach Inbetriebnahme hat das Instrument NSE 2007 den Nutzerbetrieb aufgenommen.

#### Rückstreuспекrometer SPHERES:

Die größte Herausforderung bei der Inbetriebnahme dieses innovativen Instruments, das sich durch einen Phasenraumtransformator und einen Dopplerantrieb mit Linearmotor auszeichnet, liegt in der Minimierung des Untergrunds. 2007 konnte das Signal-zu-Untergrundverhältnis auf 330:1 gesteigert werden, bei einer Energieauflösung bis zu 0,65 Mikroelektronenvolt und einem dynamischen Bereich von +/-31 Mikroelektronenvolt. Weitere Untergrundquellen konnten identifiziert werden, womit es absehbar wird, dass sich das Signal-zu-Untergrundverhältnis in Bälde auf 500:1 steigern lässt. Mit der jetzigen Konfiguration konnten bereits verschiedene erfolgreiche Experimente durchgeführt werden, die auch in einer Veröffentlichung mündeten. SPHERES befindet sich im regulären Nutzerbetrieb.

#### Kleinwinkelanlagen KWS-1, KWS-2 und KWS-3:

Für den vollständigen Aufbau der 40 m langen Kleinwinkelanlagen ist eine Erweiterung der Neutronenleithalle in Richtung FRM I vonnöten. Aufgrund komplizierter Genehmigungsverfahren hat sich diese relativ bescheidene Baumaßnahme erheblich verzögert. In einer ersten Phase konnten die drei Kleinwinkelanlagen daher nur soweit aufgebaut werden, wie es die eingeschränkten Platzverhältnisse in der existierenden Halle zuließen. Die fokussierende Kleinwinkelanlage KWS-3 konnte komplett errichtet werden. Bei der Inbetriebnahme wurde im Vergleich zur ursprünglichen Position am FRJ-2 ein deutlich schlechteres Signal-zu-Untergrundverhältnis festgestellt, an dessen Verbesserung gearbeitet wird. Eine der beiden Lochblendenkameras KWS-2 konnte in einer Kurzversion mit einem Probe-Detektor-Abstand bei 8 m realisiert werden. Für die zweite Lochblendenkamera KWS-1 wurde die Kollimationsstrecke errichtet. Beide Anlagen, KWS-1 und KWS-2, haben in Garching eine neue Kollimationsstrecke mit größerem Querschnitt erhalten (50 x 50 Quadratmillimeter statt bisher 30 x 30 Quadratmillimeter), was insbesondere beim Einsatz von fokussierenden Linsen zu einem Intensitätsgewinn führen wird. Erste Tests mit Magnesiumdifluorid-Linsen verliefen sehr Erfolg versprechend. Der Fluss der KWS-2 kommt bis auf 30 % an den Fluss der weltweit führenden Kleinwinkelanlage, dem Instrument D22 am ILL, heran. In der Kurzversion ging die KWS-2 im September 2007 mit internen und externen Nutzern in Betrieb.

#### Reflektometer TREFF und MARIA:

In der Neutronenleithalle des FRM II wird das neue Reflektometer MARIA für die Untersuchung von dünnen magnetischen Schichten bzw. lateralen magnetischen Nanostrukturen mit vollständiger Polarisationsanalyse aufgebaut. Für eine Übergangszeit wurde das ehemalige HADAS-Reflektometer des FRJ-2 nach einigen wesentlichen Umbauten und Verbesserungen als Testreflektometer TREFF an den FRM II transferiert. An seinem neuen Standort hat das Instrument einen um einen Faktor 3 höheren Fluss. Eine Nullfeldkammer zur vektoruellen Polarisationsanalyse und für Depolarisationsmessungen in Transmission, die sich in Jülich am Messplatz LAP-ND befand, wurde an TREFF als Option integriert. TREFF bietet damit einen sehr flexiblen Aufbau als Magnetismusreflektometer und Neutronenoptikmessplatz. In dieser Funktion ermöglicht es einerseits Experimente zur Methodenentwicklung (Larmorpräzessionstechniken, <sup>3</sup>He-Filterzellen etc.) und andererseits zur Charakterisierung von Neutronenleiterelementen, Monochromatoren, Polarisatoren, Detektoren etc. Seit seiner Inbetriebnahme im Sommer 2007 ist das Instrument ständig überbucht.

Für das neue Magnetismusreflektometer MARIA wurde 2007 die neutronenoptische Auslegung abgeschlossen. Monte-Carlo-Simulationen ergeben eine Intensitätssteigerung gegenüber dem ehemaligen Reflektometer HADAS von über 2 Größenordnungen. Das Instrument wird neben reinem Reflektometerbetrieb eine Option für Kleinwinkelstreuung unter streifendem Einfall, GISANS, erhalten. Durch Kombination von Geschwindigkeitsselektor und Chopper wird sich eine Wellenlängeunschärfe von 1 % bis zu 10 % einstellen lassen. 2007 wurden die wesentlichen Komponenten konstruiert und in die Fertigung gegeben. Kommerziell erhältliche Komponenten, wie Geschwindigkeitsselektor und Hexapod, wurden bestellt und sollen Anfang 2008 ausgeliefert werden. Nach Testaufbau in Jülich soll das Instrument bis Ende 2008 in der Neutronenleithalle des FRM II aufgebaut sein.

### Kaltes Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse DNS:

Das Instrument DNS ist das einzige Flugzeitspektrometer weltweit, das für eine Multidetektorbank sowohl longitudinale als auch vollständige dreidimensionale - oder Vektorpolarisationsanalyse ermöglicht. Beim Umzug nach München sind fast alle Komponenten des Instruments erneuert worden. So hat es bereits einen neuen doppelfokussierenden Monochromator, neue Primär- und Sekundärabschirmung, einen neuen fokussierenden Polarisator mit  $m=3$  und eine zusätzliche Detektorbank erhalten. Der wesentliche Meilenstein im Jahr 2007 war die Inbetriebnahme mit polarisierten Neutronen. Dabei konnte bei einer Wellenlänge von 0,474 nm ein polarisierter Neutronenfluss von 5 Millionen Neutronen pro Quadratcentimeter und Sekunde und ein hervorragendes Flipverhältnis von über 50 erzielt werden. Direkt nach der Inbetriebnahme wurden mehrere Experimente mit Polarisationsanalyse im Diffraktionsmodus durchgeführt. An verschiedenen aktuellen Materialien wurden erfolgreich magnetische Fluktuationen bestimmt und gleichzeitig konnte die Stabilität und Strahlqualität des Instruments erhöht werden. DNS wird erst im Diffraktionsmodus in den regulären Nutzerbetrieb gehen, bevor es 2008 die neuen Chopper und den Multidetektor erhält.

### Thermisches Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse TOPAS:

Nachdem sich ein Umzug des Flugzeitspektrometers SV-28 vom FRJ-2 an den FRM II aus Platzgründen als nicht machbar erwiesen hat, wird ein neues thermisches Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse TOPAS realisiert. 2007 wurde das Instrument neutronenoptisch ausgelegt. Die Probenposition befindet sich 48 m von der Reaktorwand entfernt in der zukünftigen Leiterhalle Ost. Der Neutronentransport erfolgt mit Hilfe von elliptisch fokussierenden Leitern, wobei zwei Grobchopper zu jedem Zeitpunkt die direkte Sicht verhindern und damit den Untergrund durch epithermische Neutronen unterdrücken. Ein aus zwei Choppem bestehendes Fermichoppersystem kurz vor der Probe produziert etwa 10 Mikrosekunden lange Pulse, wobei einer der Chopper mit bis zu 36.000 Umdrehungen pro Minute (600 Hz) umlaufen muss. Die aus 400 linear ortsauflösenden  $^3\text{He}$ -Zählrohren bestehende Detektorbank befindet sich in einem vollständig evakuierbaren Detektortank. Sie wird einen Raumwinkel von  $\pi$  Steradian überdecken und Experimente mit Einkristallen ermöglichen. 2007 wurde parallel zur Auslegung mit der Detailkonstruktion der Komponenten begonnen.

### **Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)**

Forschung mit Neutronen am Forschungszentrum Jülich ist sehr gut eingebunden in nationale und internationale Netzwerke. Die Errichtung der Außenstelle des Forschungszentrums Jülich am Forschungsreaktor FRM II der TU München und die Durchführung des Neutronenpraktikums zusammen mit mehreren NRW Universitäten sind besonders gelungene Beispiele für die Vernetzung des Forschungszentrum Jülich mit universitären Einrichtungen. Nutzerexperimente europäischer Nutzer werden durch das EU-FP6-Access-Programm unterstützt. Jülich ist außerdem Koordinator des EU-Exzellenznetzwerks "Soft Matter Composites" (SoftComp), das 2004 gegründet wurde und in dem 19 akademische Institute und fünf Industriefirmen aus mehreren europäischen Ländern im Bereich der Erforschung weicher Materie zusammen arbeiten. Als Beispiel für eine Vernetzung auf dem Gebiet der Methodenentwicklung sei das größte der gemeinsamen Forschungsnetzwerke für Neutronenstreuung innerhalb des EU-FP6-Programms erwähnt. Dieses Netzwerk ist der Entwicklung von fortschrittlichen Larmorpräzessionstechniken und Polarimetrie für Neutronenstreuung gewidmet. Das Forschungszentrum Jülich koordiniert diese Forschung über "Neutronenpolarisationstechniken" PNT, die insgesamt 20 internationale Partner und Beobachter zusammenbringt. Daneben ist das Forschungszentrum Jülich an weiteren europäischen Netzwerken beteiligt, wie etwa DETNI zur Detektorentwicklung, NSF zur Entwicklung von Neutronenpolarisationsfiltern oder EURISOL zum Transport- und Aktivierungsverhalten von Hochenergieneutronen. Wissenschaftler des Forschungszentrums Jülich arbeiten in verschiedenen Berater- und Aufsichtsgremien anderer Neutronenzentren zum Teil in führender Position mit, etwa bei ILL, PSI, LLB oder FRM II.

Nachwuchsförderung im Bereich von Großgeräten ist eine Kernaufgabe der HGF-Zentren. In Zusammenarbeit mit verschiedenen Universitäten veranstaltet das Forschungszentrum Jülich seit einem Jahrzehnt eine jährliche Neutronenschule. Dieses Praktikum ist bei weitem die größte Schule dieser Art in Deutschland und eine der größten weltweit. Trotz des Umzugs der Instrumente nach München gelang es uns, lückenlos auch in den Jahren 2006 und 2007 eine Neutronenschule anzubieten; ca. 50 Studentinnen und Studenten nahmen jeweils teil. 2007 wurde die Schule vom 3. bis zum 14. September veranstaltet. Der Vorlesungsteil in der ersten Septemberwoche, zu dem es ein ausführliches Skript in Buchform gibt, fand am IFF in Jülich statt. Für den experimentellen Teil in der zweiten Septemberwoche am FRM II standen 10 Instrumente zur Verfügung, sechs Instrumente des JCNS und weitere vier von Universitätsgruppen. Neben der Neutronenschule hat das Forschungszentrum Jülich 2007 wieder eine methodisch orientierte IFF-Ferienschule mit dem Titel "Probing the Nanoworld - Microscopies, Scattering and Spectroscopies of the

Solid State" veranstaltet. Ca. 270 Studentinnen und Studenten wurden vom 12. bis 23. März in die Geheimnisse der verschiedenen Methoden eingeführt. Während in dem Kurs die Neutronenstreuung eine zentrale Rolle gespielt hat, waren insbesondere die Querverbindungen zu anderen Methoden von Interesse.

### **Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)**

Das Forschungszentrum Jülich trägt zur Instrumentierung der ersten MW-Spallationsneutronenquelle SNS in Oak Ridge mit dem Bau des Spinechospektrometers NSE bei. Die wesentlichen technischen Innovationen des NSE bestehen im erstmaligen Einsatz von supraleitenden Solenoiden in Kombination mit neuartigen Korrekturspulen und einer vollständigen magnetischen Abschirmung. Damit können ein Feldintegral von 1,8 Tm bei einer relativen Homogenität besser als ein Millionstel für verschiedene Neutronenflugwege und eine Spinechozeit von mindestens 1 Mikrosekunde erreicht werden, entsprechend der weltbesten Energieauflösung von 0,7 neV. 2007 wurden die supraleitenden Spulen gefertigt, das eigentliche Sekundärspektrometer mit Streuarm am Forschungszentrum Jülich aufgebaut und mechanisch und elektronisch in Betrieb genommen. Parallel dazu wurde an der SNS der dortige Aufbau des Instruments vorbereitet, mit Primärstrahlführung und Aufbau der Strahlenschutz- und Magnetfeldabschirmung. Die Inbetriebnahme des Instruments ist für 2009 vorgesehen. Um deutschen Nutzern darüber hinaus Zugang zu anderen Instrumenten dieser Quelle der nächsten Generation zu verschaffen, beteiligt sich das Forschungszentrum Jülich am Betrieb des Rückstreuerspektrometers BASIS und des Pulverdiffraktometers POWGEN3. BASIS ging 2007 in Betrieb. Es zeichnet sich durch eine gute Energieauflösung (ca. 2,5 Mikroelektronenvolt) bei sehr großem dynamischem Bereich (ca. +/- 260 Mikroelektronenvolt) aus. Messzeit an diesem Instrument kann über das JCNS-Antragverfahren nachgefragt werden.

## **Weitere Programmentwicklung**

Die Methodenentwicklung wird an allen JCNS-Instrumenten konsequent weitergeführt. 2008 sollen nach und nach die folgenden Instrumente bzw. Instrumentoptionen in Betrieb genommen werden bzw. in den Nutzerbetrieb übergehen: KWS-1 und KWS-2 in voller Länge von 40 m, DNS im Flugzeitmodus, MARIA. Einige Instrumententwicklungen sind bereits unter B beschrieben.

Die beiden Kleinwinkel-Lochblendenkameras KWS-1 und KWS-2 werden weiterentwickelt, sobald die bauliche Erweiterung der Neutronenleiterhalle des FRM II abgeschlossen ist. Ein zeitlich gestaffelter Umbau der Anlagen soll Einschränkungen im Nutzerbetrieb möglichst klein halten. Eines der beiden Instrumente (KWS-2) wird ausgelegt für Experimente mit höchster Intensität (20 % Geschwindigkeitsselektor). Das andere Instrument wird optimiert für hohe relative Impulsraumauflösung mit einem einstellbaren Choppersystem. Es wird eine Option für Kleinwinkelstreuung unter streifendem Einfall erhalten und mit Neutronenpolarisationsanalyse ausgerüstet werden. Beide Instrumente werden Neutronenlinsen erhalten, um Zählraten und Auflösung zu verbessern.

Das kalte Flugzeitspektrometer DNS wird mit schnell drehenden Scheibenchoppem ausgerüstet, um im Flugzeitmodus eine hohe Energieauflösung zu erzielen. Eine neue große Detektorbank bestehend aus linear ortsaufauflösenden <sup>3</sup>He-Detektorrohren wird die Effizienz des Instruments um Größenordnungen verbessern.

Als Neubau werden das Magnetismusreflektometer MARIA (siehe Abschnitt B) und das thermische Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse TOPAS realisiert. MARIA soll in einer ersten Version - mit polarisiertem Strahl, aber noch ohne Polarisationsanalyse - 2008 in der Neutronenleiterhalle des FRM II aufgebaut werden. Für 2009 sind der Ausbau mit Polarisationsanalyse und die Inbetriebnahme mit Neutronen vorgesehen. TOPAS soll in der zukünftigen Neutronenleiterhalle Ost aufgebaut werden. Die TU München, als Betreiber des FRM II, muss hierfür noch die Voraussetzungen schaffen: Austausch des Stopfens, Entwicklung der Infrastruktur in der existierenden Halle, Zwischengebäude zur Aufnahme der Neutronenleiter und kerntechnisches Genehmigungsverfahren. Parallel hierzu wird die Polarisationsanalyse über einen großen Raumwinkel entwickelt, das Instrument in Jülich aufgebaut und bereits ohne Neutronen getestet.

Im Zuge des Milleniumprogramms des ILL muss das kalte Flugzeitspektrometer IN12 verlagert werden. Es wird eine Endposition an einem neuen Neutronenleiter erhalten. In Verbindung mit diesem Umzug sind mehrere Verbesserungen vorgesehen, die sicherstellen werden, dass das Instrument sich weiterhin an vorderster Front befindet. Ein System aus fokussierendem Leiter, Geschwindigkeitsselektor und doppelfokussierendem Monochromator wird zur Intensitätserhöhung auch für kleine Proben und zur Untergrundminimierung beitragen. Das Multianalysatorsystem UFO wird es erlauben, ganze

Dispersionskurven auf einmal zu messen, wobei sie gewisse Schwächen anderer Multianalysatorkonzepte, wie RITA und "Flat Cone", zu vermeiden sucht.

Während nach dem Umzug der JCNS-Instrumente nach München die Nutzergruppen aus dem Bereich "Magnetismus" und "Weiche Materie" exzellente Messmöglichkeiten am FRM II vorfinden werden, tut sich, nicht zuletzt durch die Abschaltung des FRJ-2, eine schmerzhaft Lücke für die Gebiete Festkörperchemie, Geowissenschaften und Lebenswissenschaften auf. Zwei Projektvorschläge wurden ausgearbeitet, um diese Lücke durch neue JCNS-Instrumente zu schließen: ein thermisches Flugzeitdiffraktometer POWTEX und ein Biodiffraktometer. Für beide gelang es 2007, die erste Tranche der für den Bau benötigten Finanzen einzuwerben. Nach Fertigstellung dieser beiden Instrumente wird JCNS den Nutzern am FRM II 10 Instrumente im regulären Nutzerbetrieb plus einen Neutronentestmessplatz (TREFF) anbieten können.

Mit dem Höchstintensitätsdiffraktometer POWTEX wird durch Auslegung als Flugzeitdiffraktometer an einer kontinuierlichen Neutronenquelle methodisches Neuland betreten und ein Instrument entstehen, welches eine internationale Spitzenstellung belegen wird. Das geplante Instrument zur Untersuchung polykristalliner Materie ist wegen seiner hohen Intensität bei guter Auflösung präzise auf die besonderen Anforderungen der Festkörperchemie, der Materialwissenschaften und der Geowissenschaften zugeschnitten. Durch die Kombination mehrerer innovativer Konzepte - Strahlkompressor, gegenläufige Scheibenchopper, doppelfokussierender Leiter, Nutzung der vollen Debye-Scherrer-Kegel mit ortsaflösenden  $^3\text{He}$ -Zählrohren und Mehrfachmessung vieler Reflexe - ergibt sich ein Intensitätsgewinn von mindestens 5 verglichen mit konventionellen Monochromator- oder traditionellen Flugzeitinstrumenten. Die Ergebnisverwertung liegt bei den in einem Kompetenzverbund von derzeit 16 zusammengeschlossenen Nutzerinstituten (bzw. 22 Arbeitsgruppen) und in der Methodenentwicklung, auch für gepulste Quellen. Ein Antrag der RWTH Aachen (Institut für Anorganische Chemie, Prof. Dronskowski) auf Förderung des Baus dieses Instruments im Rahmen der BMBF-Verbundforschung war erfolgreich: in der ersten Förderperiode konnten etwa die Hälfte der benötigten Investitionsmittel eingeworben werden. Das Instrument soll am Forschungszentrum Jülich gebaut werden, wobei die Details der Zusammenarbeit zwischen RWTH Aachen und Forschungszentrum Jülich vertraglich geregelt werden. Die Universität Göttingen wird das Interesse der geowissenschaftlichen Nutzergemeinde vertreten. Es ist geplant, dass die beiden universitären Gruppen das Instrument nach Fertigstellung im Rahmen von JCNS betreiben werden.

Das geplante Biodiffraktometer soll für die Strukturbestimmung an Proteinkristallen zum Einsatz kommen. Als komplementäre Information zur Röntgenstrukturanalyse an Synchrotronstrahlungsquellen wird es die Bestimmung der Position der Wasserstoffatome, insbesondere in der Hydrathülle, erlauben. Deren Assoziationsverhalten ist wesentlich mitbestimmend für die Funktion von Biomolekülen. Vorhandene Einkristalldiffraktometer für die Festkörperforschung sind für den oben genannten Zweck nicht geeignet. Für die Proteinkristallographie muss das Diffraktometer in der Lage sein, die nahe beieinander liegenden Braggreflexe der sehr großen Einheitszellen zu trennen und mit hoher Effizienz und Genauigkeit viele Tausende von Reflexintensitäten zu messen. Die Probengröße bleibt dabei meist unterhalb von ca. 1 Kubikmillimeter. Dies erfordert eine angepasste Präparation (Monochromatisierung, Kollimation) des einkommenden Strahls sowie eine spezielle Detektionstechnik mit sehr hoher Ortsauflösung und Raumwinkelabdeckung. 2007 ist es gelungen, Mittel zum Bau des Diffraktometers aus dem Innovationsfonds des Forschungszentrums Jülich einzuwerben. Das Instrument soll zusammen mit der TU München realisiert und später gemeinsam betrieben werden.

- 
- [Detailergebnisse](#)
  - [Publikationen](#)
  - [Patente](#)
-

# Molekulare Magnete

Programmungebundenes Vorhaben

- keine HGF-Zuordnung

**Beteiligtes Institut:**  IFF

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Paul Kögerler, IFF, [✉ p.koegerler@fz-juelich.de](mailto:p.koegerler@fz-juelich.de)

## Highlight

Die Manipulation der elektrischen Transporteigenschaften ist ein wesentliches Element der Spintronik, ein Forschungsgebiet, in dem die Möglichkeiten aktueller Sensor- sowie Bauelementkonzepte nach der Zeit des CMOS exploriert wird. Im Zentrum steht hier die gemeinsame Nutzung elektronischer und magnetischer oder Spinfreiheitsgrade, welche auf der spezifischen Wechselwirkung von spinpolarisierten elektrischen Ladungsträgern mit magnetischen Materialien basiert. Eine sehr innovative Forschungsrichtung versucht, magnetische Konzepte mit molekularen Systemen zu verknüpfen, um etwa die molekulare Funktionalität von Spin-Transistoren oder Spin-Dioden zu erzeugen. Neue Ansätze zielen zudem auf die Stabilisierung oder Manipulation von quantenkohärenten Zuständen, für die magnetische Moleküle infolge ihrer langen kohärenten Lebensdauern als besonders geeignete Systeme in Frage kommen. In diesem Kontext stellen magnetische Moleküle auch prototypische Modellsysteme für Quanteninformationsverarbeitung dar.

Aus diesem Grunde haben wir z.B. molekulare Systeme, die aus molekularen Metall-Aromatring-Schichtanordnungen bestehen, mittels quantenmechanischer Rechnungen untersucht. Das lokale magnetische Moment der Metallzentren kann dann in seiner Ausrichtung relativ zur Molekülgeometrie gezielt durch den Ladungszustand des Moleküls kontrolliert werden - eine unmittelbare Kopplung zwischen elektrischem Ladungszustand und magnetischem Ortsvektor. Dichtefunktionaltheoretische Rechnungen erlauben auch die Vorhersage von Transporteigenschaften (z.B. ballistischer, anisotroper Magnetowiderstands-Effekt) für diese Systeme.

Gleichzeitig hat die neu eingerichtete Forschungsgruppe verschiedene synthetische Arbeiten aufgenommen, die auf strukturell robuste Metalloxid-basierte Hochspinsysteme abzielen. Solche Systeme lassen sich in verschiedenen Anordnungen an Grenzflächen anbinden und zeigen verschiedene magnetische Ordnungsphänomene, die in solchen Molekül-Grenzflächen-Hybridsystemen auf ihre Schalt- und Speicherfunktionen mittels Einzelmolekülmessungen untersucht werden.

## Ziele

Das Forschungszentrum Jülich und die RWTH Aachen planen in den kommenden Jahren das aufstrebende Gebiet des molekularen Magnetismus gemeinsam zu erforschen, seit 2007 auch im Kontext von JARA-FIT. Techniken der molekularen Chemie werden entwickelt und angewendet, um neue molekulare Magnete mit dedizierten Eigenschaften zu planen und herzustellen und sie an Schichten und Oberflächen anzubinden. Das Institut für Festkörperforschung entwickelt und bringt Methoden der modernen Festkörperforschung zum Einsatz, um die Molekularen Magnete zu charakterisieren und ihre Eigenschaften zu erforschen. Zu den Methoden zählen beispielsweise die SQUID-Magnetometrie, die Neutronenstreuung, die magnetische Röntgenstreuung, die Elektronenspektroskopie und magnetischer Röntgendiffraktion,

oberflächenphysikalische Methoden, Mikroskopie-Methoden (STM, AFM, SEM) und Methoden zur Berechnung der elektronischen und magnetischen Struktur.

Molekulare Magnete sind die kleinsten magnetisch kohärenten Einheiten der Festkörperforschung. Sie erweitern die Eigenschaften klassischer Magnete in das Regime neuartiger Quantenphänomene in nanoskaligen Systemen. Die Herstellungsmethodik, besonders die Isolierung als Einkristall, erlaubt maximale Monodispersivität in Größe, Volumen, Form, Ladung und magnetischem Moment, und darüber hinaus eine spezifische Funktionalisierung der Molekularen Magnete, wie der gesteuerten Affinität gegenüber verschiedenen Oberflächen. Sie sind damit sowohl interessante Forschungsobjekte der Kondensierten Materie als auch Vorstufen zukünftiger Informationstechnologie-Bauteile. Denn ihre weitgehend über die chemische Zusammensetzung und molekulare Struktur definierten Eigenschaften eröffnen auch neue Möglichkeiten auf dem Gebiet der Nanoelektronik, insbesondere auf den Teilgebieten Spintronik, Quanteninformation und Molekularelektronik. Die Forschungsprogramme "Kondensierte Materie" und "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen" im Forschungszentrum Jülich umfassen die Topics "Elektronische und Magnetische Phänomene", "Von Materie zu Material" und "Spintronik" und werden schwerpunktmäßig im Institut für Festkörperforschung (IFF) bearbeitet. In jedem dieser Bereiche werden Aspekte der Molekularen Magnete eingebunden und untersucht. Darüber hinaus gibt es auch die Bestrebung, Molekulare Magnete im Zusammenhang mit der Entwicklung der Quanteninformation zu untersuchen sowie Molekulare Magnete auf Oberflächen als Material mit neuen Eigenschaften zu entwickeln. Das Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN) hat die Absicht, sich an der Erforschung der Grenzfläche von Molekularen Magneten und Oberfläche im Rahmen der Programme "Kondensierte Materie", Topic "von Materie zu Material" und "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen", Topic "Molecular- and Bioelectronic-Hybrid Systems" zu beteiligen.

## Ergebnisse

### Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

Das oben dargestellte Highlight: "Controlling the Magnetization Direction in Molecules via Their Oxidation State" wurde in Physical Review Letters, 100, 117207 (2008) veröffentlicht, die eng verwandte Arbeit "Interplay of structure and spin-orbit strength in magnetism of metal-benzene sandwiches: from single molecules to infinite wires" erschien in Nanotechnology, 18, 495402 (2007). Eine erste experimentelle Arbeit zur Interaktion eines Metalloxid-Moleküls mit verschiedenen Oberflächen, "Reversible electron-transfer reactions within a nanoscale metal oxide cage mediated by metallic substrates", wurde in Nature Nanotechnology, 3, 229 (2008) veröffentlicht.

Im Rahmen der Etablierung der neuen, dem IFF-9 zugeordneten Arbeitsgruppe "Molekularer Magnetismus" (Prof. Paul Kögerler) konnte nach der Einrichtung der neuen Laborinfrastruktur und der Besetzung einer Postdoc-Stelle (Dr. Bogdan Botar) die ersten chemischen Synthesen durchgeführt werden, die 2007 schon zur Isolierung und chemisch-physikalischen Charakterisierung von ca. 10 neuen magnetischen Molekülen führte. Der Großteil dieser Arbeit wird in Publikationen 2008 erscheinen. Zudem wurden in Zusammenarbeit mit den in diesem Projekt involvierten Gruppen aus IFF und IBN verschiedene konkrete Arbeitsprojekte definiert und in Angriff genommen, die zunächst auf die Untersuchung von kontaktierten Einzelmolekülen in STM-Experimenten, auf Aufklärung der dynamischen Spinstruktur der Moleküle mittels polarisierter Neutronenstreuung, aber auch dem Einsatz von magnetischen Molekülen als Kontrastmitteln in der Kernresonanz-Tomographie.

### Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)

Ein Postdoktorand (Dr. Bogdan Botar) wurde eingestellt, der die Aufbauarbeiten des Labors begleitete und in der chemischen Synthese aktiv ist. Ein zweiter Postdoktorand (IFF-9) synthetisiert seit Mitte 2007 neue optisch aktive magnetische Moleküle. Im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms "Molekularer Magnetismus" (SPP 1137) wurde zusammen mit Herr Prof. J. Schnack von der Universität Bielefeld eine Postdoc-Stelle eingeworben, die im Juli 2007 durch Herr Dr. Predrag Lazic besetzt wurde.

## Weitere Vorhabensentwicklung

Es ist geplant, Molekulare Magnete zu synthetisieren, die sich ganz speziell für die Deposition auf metallischen und oxidischen Oberflächen im Ultrahochvakuum eignen. Parallel dazu werden erste theoretische Untersuchungen der Eigenschaften von molekularen Magneten mit Lanthaniden und der Wechselwirkung von molekularen Magneten mit metallischen Oberflächen durchgeführt. Der Aufbau des chemisch-synthetischen Programms zielt darüber hinaus ab auf neue magnetische Moleküle, in denen allgemein interessante physikalische Effekte (z.B. Ordnungsphänomene, Phasenübergänge, hysteretische Eigenschaften) realisiert werden, die für die Integration in nanoskalierte Elektronikbausteine prinzipiell von Interesse sind.

# Nationales Höchstleistungsrechenzentrum John von Neumann-Institut für Computing (NIC)

[Homepage NIC](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert, ZAM [Th.Lippert@fz-juelich.de](mailto:Th.Lippert@fz-juelich.de)

---

Wissenschaftliches Rechnen auf Höchstleistungsrechnern spielt international in den großen Forschungseinrichtungen seit vielen Jahren eine wichtige Rolle. Als 1983 das Forschungszentrum Jülich mit der Installation des Rechners CRAY X-MP, des ersten Vektorrechners dieser Leistungsklasse in Europa, in das Supercomputing einstieg, wurden hier neue Akzente gesetzt. Das wissenschaftliche Rechnen wurde seitdem in Richtung Höchstleistungsrechnen, Simulation und Modellierung konsequent fortentwickelt, sowohl durch die Erforschung neuer Algorithmen und Methoden und durch die Erweiterung des Anwendungsspektrums als auch durch den Ausbau der innovativen Rechnerausstattung. Die Supercomputer bilden die apparative Basis für das wissenschaftliche Rechnen im nationalen Höchstleistungsrechenzentrum, John von Neumann-Institut für Computing (NIC).

## **Einsatz des Großgeräts (Vorgaben, Ziele, Nutzen, Ergebnisse usw.)**

Kernstück der apparativen Basis des NIC ist ein dualer Supercomputer-Komplex. Er besteht aus einem "General Purpose"-Supercomputer (derzeit JUMP) und aus einem hochskalierenden "Leadership-Class"-Supercomputer (derzeit JUGENE) für die sog. "Grand Challenge"-Anwendungen. Beide Systeme stehen Forschungsprojekten aus Deutschland und Europa zur Verfügung, die ein am NIC etabliertes wissenschaftliches "Peer Review"-Verfahren erfolgreich durchlaufen haben. Insbesondere werden auf den Jülicher Supercomputern Projekte durchgeführt, deren Systemanforderungen die Kapazitäten von Höchstleistungsrechnern an Universitäten oder regionalen Zentren weit übertreffen und die sonst nur auf vergleichbaren Rechnern in den USA oder Japan bearbeitet werden könnten. Der duale Supercomputer-Komplex in Jülich ermöglicht so im Bereich der "Computational Sciences" innovative Spitzenforschung in Deutschland. Die Ergebnisse sind von hoher wissenschaftlicher Relevanz und werden in renommierten Fachzeitschriften publiziert.

## **Analyse der Zielerreichung**

Im Berichtsjahr wurde ein Ausbau des Supercomputer-Komplexes realisiert, der die Spitzenposition Jülichs im Supercomputing nicht nur gefestigt, sondern sogar verbessert hat. Außerdem konnten Programme neuer Projekte aus den Biowissenschaften, der medizinischen Strömungsforschung und der Materialwissenschaft auf den "Leadership-Class"-Supercomputer portiert und in optimierter Weise ausgeführt werden.

## **Planung des Berichtsjahres**

Die hohe Akzeptanz und Auslastung des "Leadership-Class"-Supercomputers JUBL im Jahr 2006 sowie der anhaltend rasante Fortschritt im Supercomputing begründeten im Frühjahr 2007 die Entscheidung des Forschungszentrums Jülich, diesen Rechner durch ein im Herbst 2007 verfügbares und deutlich leistungsfähigeres System vom Typ IBM Blue Gene/P zu ersetzen. Des Weiteren erforderten zunehmend unterschiedliche Anforderungen an die Supercomputer JUMP und JUBL, die Verwaltung des gemeinsamen File-Systems, die bisher von JUMP wahrgenommen wurde, in ein dediziertes System auszulagern.

## **Planerreicherung des Berichtsjahres**

Im Oktober 2007 wurde das Jülicher IBM Blue Gene/P-System JUGENE mit 65.536 Prozessoren und einer Spitzenleistung von 223 Tflop/s aufgebaut und getestet. JUGENE ist der weltweit leistungsfähigste Rechner für die zivile Forschung; er wurde im November 2007 auf Platz 2 der TOP500-Liste geführt. JUGENE ist wie JUBL ausschließlich für eine begrenzte Anzahl von Anwendungen aus dem Bereich des Capability Computing vorgesehen, also für Anwendungen, die in besonderem Maße für hohe Prozessorzahlen geeignet sind. Im November/Dezember 2007 wurde JUGENE für die Aufnahme des Produktionsbetriebs vorbereitet. Erste Tests mit dem neuen System zeigten, dass - bedingt durch Architekturverbesserungen gegenüber dem Vorgängermodell - reale Anwendungen einen prozentual höheren Anteil der Spitzenleistung abrufen konnten als bei JUBL. Insgesamt erhielten 2007 etwa 30 Projekte nach Durchlaufen des "Peer-Review"-Verfahrens Zugang zum "Leadership-Class"-Supercomputer.

Im zweiten Halbjahr 2007 nahm auch der hochmoderne Datenserver JUST den Betrieb auf. Er übernahm die File-Server-Funktionalität von JUMP, verfügt über eine Plattenspeicherkapazität von einem PByte, hat eine maximale I/O-Bandbreite von 20 GByte/s und ist mit den Supercomputern JUMP und JUGENE über eine neue, auf 10-Gigabit-Ethernet basierende Switch-Technologie verbunden.

## **Maßgebliche Abweichungen**

Keine

## **Besondere Vorkommnisse**

Keine

## **Gesamteinschätzung der Entwicklung und Vorausschau**

Derzeit ist ein Ende der rasanten Entwicklung im Bereich Supercomputing nicht abzusehen. Dies bedingt permanente Innovation der vorhandenen Supercomputer-Infrastruktur, wenn die erreichte Spitzenposition gehalten oder sogar ausgebaut werden soll. Damit verbunden ist ein hoher Zuwendungsbedarf, der zurzeit in Einmalaktionen eingeworben wird. Eine Verstetigung dieses Mittelzuflusses ist dringend erforderlich.

Aktuell wird die Erneuerung des "General-Purpose"-Supercomputers JUMP vorbereitet. Als Nachfolgesystem wird ein Cluster favorisiert, bestehend aus 2048 Intel Nehalem-Prozessoren, dem Quadrics QSnetIII-Netzwerk und der Cluster-Management-Software ParaStation. Dieses System, das über eine Spitzenleistung von etwa 200 Tflop/s verfügen wird, soll nach den Vorgaben eines vom JSC etablierten Design-Teams von einem Integrator zusammengebaut und gewartet werden. Mit dieser Vorgehensweise kann in Jülich ein System in Produktion genommen werden, das der marktüblichen Technologie um ca. ein Jahr voraus ist. Das JSC hat diese Architektur auch der europäischen Fusions-Community EFDA für einen High-Performance-Computer vorgeschlagen. Bei Bewilligung des Antrages kann die dafür notwendige Rechenkapazität durch eine Erweiterung des "General Purpose"-Supercomputers um zusätzliche 1.024 Rechenknoten mit ca. 100 Tflop/s realisiert werden.

Geplant wird ebenfalls - unter Vorbehalt eines positiven BMBF-Zuwendungsbescheids - ein Ausbau des JUGENE-Systems im Jahr 2008/2009 und die Beschaffung eines Petaflops-Rechners im Jahr 2009/2010, der z. T. mit europäischen Mitteln finanziert werden soll.

Die mittelfristige Rechnerplanung in Jülich ist abgestimmt mit der Rechnerplanung der beiden anderen nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Garching und Stuttgart. Die Abstimmung erfolgt im Rahmen des im Jahr 2006 gegründeten nationalen Gauss Centre for Supercomputing (GCS). Für das GCS konnte im Frühjahr 2007 die Rechtsform eines gemeinnützigen eingetragenen Vereins realisiert werden. Außerdem wurde von den drei im GCS vertretenen Höchstleistungsrechenzentren ein Geschäfts- und Organisationsplan entwickelt, der zurzeit mit den Trägern und Finanzgebern verhandelt wird. Gegenstand dieser Verhandlungen ist auch die bereits angesprochene Verstetigung des Mittelzuflusses. Weiterhin wurde die Gründung einer HPC-Allianz vorbereitet, eines Verbundes der regionalen und der thematisch fokussierten HPC-Zentren, und deren Kooperation mit dem GCS.

Auf europäischer Ebene sind die Rechnerplanungen in Jülich eingebunden in die Aktivitäten des Konsortiums PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe), einer Interessensgemeinschaft von

14 europäischen Ländern, die sich im April 2007 zum Aufbau und Betrieb einer nachhaltigen, in ein europäisches HPC-Ökosystem eingebetteten HPC-Infrastruktur in Europa verpflichtet haben, wie sie im September 2006 vom European Strategy Forum on Research Infrastructures (ESFRI) gefordert wurde. Die erste gemeinsame Aktion des neuen Bündnisses war die erfolgreich verlaufene Beantragung eines EU-Projektes, in dessen Rahmen in den Jahren 2008 und 2009 die organisatorischen und technischen Vorbereitungen zur Etablierung eines verteilten Europäischen HPC-Zentrums der höchsten Leistungsstufe als eigenständige Forschungsinfrastruktur getroffen werden sollen.

---

# Kühler-Synchrotron COSY

[☞ Homepage COSY](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Rudolf Maier, IKP, [✉ r.maier@fz-juelich.de](mailto:r.maier@fz-juelich.de)

---

## Einsatz des Großgeräts

Die Beschleunigeranlage COSY ist ein Großgerät der Grundlagenforschung und dient der Erforschung der Struktur der subatomaren Materie. Dieses Gerät stellt aufgrund seiner besonderen Kombination von herausragenden Eigenschaften eine einzigartige Anlage in der Welt dar. Es enthält zwei komplementäre Kühlsysteme, die es ermöglichen, Strahlen höchster Brillanz zu erzeugen. Dabei werden die Elektronenkühlung bei niedrigen Strahlenergien und das stochastische Kühlverfahren im oberen Energiebereich eingesetzt. Für die Untersuchung der subatomaren Struktur stellt es den Experimentatoren polarisierte und unpolarisierte Protonen- und Deuteronenstrahlen mit einem Impuls von maximal 3,7 GeV/c zur Verfügung. Die Anlage ist so konzipiert, dass sowohl interne Experimente mit dem zirkulierenden Strahl durchgeführt werden können, als auch externe Experimente.

Mit COSY werden Proton- oder Deuteron-induzierte Reaktionen an Wasserstoff oder schwereren Targets studiert, um dadurch Einblicke in Struktur und Dynamik der Baryonen und Mesonen sowie deren Eigenschaften im nuklearen Medium zu erhalten. Ziel ist das Verständnis der Struktur der Hadronen im mittleren Energiebereich, der nicht durch QCD-Störungsrechnungen beschrieben werden kann. COSY ist mit seinen hadronischen Sonden komplementär zu den Elektronenbeschleunigern wie MAMI (Mainz), ELSA (Bonn) und Jefferson Lab (USA). Die enge Verflechtung zwischen den Experimenten und dem Beschleuniger erfordert einen äußerst intensiven Kontakt zwischen den Betreibern von COSY und den Gruppen, die den Strahl für ihre Experimente einsetzen. Um eine optimale Nutzung und Weiterentwicklung zu gewährleisten, haben sich die Nutzer in der CANU Arbeitsgemeinschaft (Akronym: COSY Association of Networking Universities) organisiert. Diese Art der Zusammenarbeit hat sich als sehr erfolgreich herausgestellt.

Die Teilchenstrahlen von COSY werden von Wissenschaftlern von deutschen und ausländischen Hochschulen und Forschungseinrichtungen genutzt. COSY gehört zu den Forschungsgeräten der Verbundforschung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung und wird auch im Rahmen des europäischen Forschungsprogramms genutzt als einer der herausragenden Beschleuniger des Programms "Light Ion Facilities Europe" (LIFE). Die Vergabe von Strahlzeiten für Experimente erfolgt durch ein international besetztes Komitee (PAC) entsprechend der wissenschaftlichen Bedeutung der Experimente.

## Analyse der Zielerreichung

Die Verfügbarkeit von COSY hat eine hohe Priorität, da jeder Ausfall mit hohen Kosten und großen Zeitverzögerungen für die Experimente verbunden ist, bedingt durch deren hohe Komplexität und aufwendige Logistik. Ebenso wichtig ist die stetige Anpassung der Maschine an die wechselnden experimentellen Anforderungen sowie die Integration neuer Experimentanordnungen. Der Bereitstellung von polarisierten Protonen- und Deuteronenstrahlen mit hoher Intensität kommt große Bedeutung zu. Alle Anstrengungen zielen darauf hin, das wissenschaftliche Potenzial auszuweiten. Das IKP wird in seinen Anstrengungen unterstützt durch Mitarbeiter der Zentralabteilung Technologie (ZAT) und des Zentralinstitutes für Elektronik (ZEL). Im ersten Fall geht es um die Entwicklung neuer Beschleunigerkomponenten und der damit verbundenen Technologie, während beim ZEL elektronische Systeme zur Aufbereitung der Signale von Messsonden, Regelsysteme zur Strahlaufbereitung und Steuerungskomponenten für den Betrieb im Vordergrund stehen.

## Planung des Berichtsjahres

Im Berichtsjahr war eine Betriebszeit von 6.448 Stunden vorgesehen. Davon sollten 20% für Maschinenentwicklungen zur Verfügung stehen. Die Zeit für Maschinenexperimente wurde genutzt, um u.a. die Spinmanipulation des polarisierten Strahles zu studieren, den Polarisationsaufbau eines unpolarisierten

Strahles durch Kernwechselwirkung zu untersuchen und um vorbereitende Messungen des Strahlverhaltens im Gleichgewicht zwischen Kühlung und Targetwechselwirkung zu untersuchen als Vorbereitungen für die zukünftigen Experimente im Hochenergiespeicherring (HESR) des FAIR-Komplexes.

### Planerreichung des Berichtsjahres

Die Weiterentwicklung von COSY wurde so durchgeführt, dass der Experimentierbetrieb möglichst wenig beeinträchtigt wurde. 2007 wurde eine Betriebszeit von 6.166 Stunden erreicht, wovon 4.874 Stunden für Experimente und 1.120 Stunden für beschleunigertechnische Aufgaben genutzt wurden.

### Nutzerbetrieb

Die Nutzer von COSY (über 300 Wissenschaftler) setzten sich zu etwa 35% aus IKP-Wissenschaftlern und zu 65% aus Forschergruppen deutscher und internationaler Forschungsinstitute bzw. Universitäten zusammen. Diese haben in den PAC-Sitzungen im November 2006 bzw. im Mai 2007 insgesamt 39 Wochen Strahlzeit beantragt. Im Strahlzeitplan für das Jahr konnten nur 28 Wochen für den Nutzerbetrieb vorgesehen werden.

Im Rahmen der Maschinenentwicklung wurden überwiegend Studien zur Strahlkühlung durchgeführt, um die Bedingungen für höchste Phasenraumdichten und Stabilitätsgrenzen zu untersuchen, sowie Gleichgewichtsbedingungen für Strahlen unter dem Einfluss interner Targets. Diese sind auch wichtig für die Optimierung des Strahlkühlkonzeptes für das FAIR-Projekt, in dem Antiprotonen- und Ionenstrahlen höchster Brillanz erzeugt werden sollen. Zum Aufbau der Polarisation für primär unpolarisierte Strahlen wurden erste Vorexperimente zur Messung und Optimierung der Strahl- und Polarisationslebensdauer durchgeführt.

Die internationale Kollaboration "SPIN at COSY" untersucht mit ihren Experimenten die Möglichkeiten der Spin-Manipulation des gespeicherten polarisierten Strahls. Neben der beschleunigerphysikalischen Relevanz haben diese Ergebnisse auch große Bedeutung bei der Durchführung von polarisierten Experimenten. Die Umkehrung der Spinrichtung des umlaufenden Strahls erlaubt im Falle von internen Experimenten, die systematischen Fehler drastisch zu reduzieren. Im Berichtsjahr konnte gezeigt werden, dass die Spinrichtung eines 1,85 GeV/c polarisierten Deuteronenstrahles mit einer Effizienz von 98,5 % umgekehrt werden kann. Im Rahmen von Maschinenentwicklungszeiten wurde mit Hilfe der Spin-Umkehr ein Verfahren entwickelt und verbessert, mit der der absolute Impuls des umlaufenden Ionenstrahles mit höchster Präzision ( $10^{-5}$ ) bestimmt werden kann. Dies konnte für Präzisionsmessungen zur Bestimmung der Masse von erzeugten eta-Mesonen genutzt werden.

### Maßgebliche Abweichungen

Gegenüber den Vorjahren konnte die Anzahl der angebotenen Strahlzeitstunden wieder erhöht werden. Der WASA-Einbau und die Inbetriebnahme des neuen Detektors konnten im angesetzten Zeitrahmen erfolgreich beendet werden. Die Ausfallquote von 5% (403 Stunden) sind zum überwiegenden Teil auf Ausfälle des Hochfrequenzsystems des inzwischen 40 Jahre alten Vorbeschleunigers zurückzuführen. Diese Ausfallzeiten wurden für die betroffenen Nutzer zum größten Teil durch Reduktion der Maschinenentwicklungszeiten kompensiert.

### Besondere Vorkommnisse

Der HESR des FAIR-Projektes eröffnet völlig neue Perspektiven für die Hadronenphysik. Die Besonderheit dieser Anlage liegt in der Kombination der Phasenraum-Kühlung, eines internen Targetplatzes mit einem den Raumwinkel nahezu vollständig überdeckenden Detektorsystem und supraleitender Strahlführungsmagneten. Im Rahmen des HESR-Konsortiums, an dem Mitarbeiter der GSI und des TSL (Uppsala) unter Führung des IKP beteiligt sind, wurde der Technische Bericht überarbeitet, das Gesamtkonzept weiter optimiert und eine Kosten- und Zeitplanung erstellt.

### **Gesamteinschätzung der Entwicklung und Vorausschau**

Es ist davon auszugehen, dass die hohe Zuverlässigkeit der Anlage auf dem erreichten Niveau gehalten werden kann und COSY wie gewohnt zur vielfältigen Nutzung zur Verfügung steht. Für das Betriebsjahr 2008 sind ca. 6.900 Betriebsstunden vorgesehen. Diese Zahl soll im Verlaufe der nächsten Jahre im Hinblick auf die zunehmende Projektarbeit für FAIR reduziert werden.

# Neutronenquelle FRJ-2

[☞ Homepage FRJ-2](#)

**Verantwortlich:** Prof. Dr. Thomas Brückel, IFF [✉ t.brueckel@fz-juelich.de](mailto:t.brueckel@fz-juelich.de)

---

## Einsatz des Großgeräts

Der FRJ-2 war nach dem FRM II die mit Abstand leistungsstärkste Neutronenquelle in Deutschland und eine der leistungsfähigsten Mittelflussquellen im internationalen Vergleich. Einschließlich seiner kalten Quelle und mit seiner hochmodernen Instrumentierung stand der FRJ-2 sowohl Helmholtz-internen als auch externen Wissenschaftlern als leistungsfähiges Großgerät zur Neutronenstreuung zur Verfügung. Entsprechend dem Beschluss des Aufsichtsrates der Forschungszentrum Jülich GmbH wurde der Reaktor am 02. Mai 2006 endgültig abgeschaltet.

In der anschließenden Nachbetriebsphase von ca. 2,5 Jahren werden alle Abbauarbeiten vorgenommen, die im Rahmen der Betriebsgenehmigung durchgeführt werden können. In wissenschaftlicher Hinsicht ist hier vor allem der Abbau der Experimentiereinrichtungen zu nennen, die am Münchener Forschungsreaktor FRM II im neu gegründeten "Jülich Centre for Neutron Science (JCNS)" wieder aufgebaut werden, bzw. die zu entsorgen sind. Die gesamte Reaktoranlage ist für die Stilllegung vorzubereiten. Parallel dazu werden alle Unterlagen erstellt, die zur Beantragung der Stilllegungs- und Abbaugenehmigung des FRJ-2 erforderlich sind. Es wird erwartet, dass im Rahmen der ersten PoF-Periode bis Ende 2009 die genannte Genehmigung noch erteilt wird und der eigentliche Abbau der Reaktoranlage beginnen kann.

## Analyse der Zielerreichung

### Planung des Berichtsjahres

Die 2006 geplanten wesentlichen Ziele für 2007 waren der Rückbau aller noch nicht demontierten Neutronenstreuexperimente, die Einleitung der Entsorgung der restlichen abgebrannten Brennelemente und des Schwerwassers sowie die Beantragung der Stilllegungsgenehmigung und die Erarbeitung der dafür notwendigen Unterlagen wie Sicherheitsbericht, Kurzfassung und detaillierende Berichte.

### Planerreichung des Berichtsjahres:

Alle wesentlichen Ziele für 2007 konnten erreicht werden.

Alle Neutronenstreuexperimente aus der Reaktorhalle wie auch dem Neutronenleiterlabor ELLA wurden im Verlauf des Jahres 2007 abgebaut. Hierzu wurde eine hochmoderne Freimessanlage angeschafft, womit der größte Teil der ca. 450 t Material uneingeschränkt freigegeben werden konnte. Die Anlage wird selbstverständlich auch für die weiteren Rückbauaktivitäten Verwendung finden. Damit ist das ELLA bis auf die leicht aktivierte Kasematte mit dem dort befindlichen Neutronenleiter vollkommen freigeräumt. Die beschriebenen Rückbauaktivitäten konnten bereits in der Nachbetriebsphase im Rahmen der noch gültigen Betriebsgenehmigung vorgenommen werden, da der Aufbau und der Rückbau von Neutronenstreuexperimenten durch einen in der Betriebsgenehmigung verankerten Reaktorsicherheitsausschuss aus Mitgliedern des Forschungszentrums Jülich selbst genehmigt werden konnte.

60 der 158 abgebrannten Brennelemente, die nach der endgültigen Abschaltung des FRJ-2 noch vorhanden waren, konnten bereits im Rahmen eines Vertrages mit dem US-amerikanischen Department of Energy entsorgt werden. Nach zweijährigen Bemühungen konnte für das hochaktive Schwerwasser, das als Kühl- und Moderatorium des FRJ-2 diente, ein Abnehmer gefunden werden und ein entsprechender Vertrag fixiert werden.

Der weitere Rückbau der Reaktoranlage bedarf einer Stilllegungsgenehmigung. Bereits im April 2007, also lediglich ein Jahr nach endgültiger Abschaltung, wurde der Antrag zu "Stilllegung und Abbau der Reaktoranlage FRJ-2 und ihrer Hilfs- und Nebenanlagen" bei der zuständigen atomrechtlichen Genehmigungsbehörde eingereicht. Vorlaufend war der Sicherheitsbericht zu diesem Antrag erarbeitet worden. Genau so wie dieser, wurden alle weiteren dazu notwendigen detaillierenden Technischen Berichte im Bereich der Zentralabteilung Forschungsreaktoren selber erstellt. Lediglich die für die Auswirkungen auf andere EU-Länder durchzuführende Untersuchung entsprechend Artikel 37 des EURATOM-Vertrages wurde in Zusammenarbeit mit dem Geschäftsbereich "Sicherheit und Strahlenschutz" erstellt. Bereits ab September 2007 begann der Gutachter der Genehmigungsbehörde mit der Bewertung der eingereichten Unterlagen, die bis Ende 2007 vollständig vorlagen.

#### Maßgebliche Abweichungen

Als positive Abweichung für 2007 kann genannt werden, dass erhebliche zusätzliche Kostenreduzierungen im Personal als auch im Sach- und Investitionskostenbereich des Reaktorbetriebes erreicht werden konnten, die der Wissenschaft im Rahmen der Modernisierung der Neutronenstreuinstrumente für das JCNS zugute kommen sollten.

#### **Gesamteinschätzung der Entwicklung und Vorausschau**

Aufgrund der termingerechten Fertigstellung der Antragsunterlagen wird weiterhin erwartet, dass die Stilllegungsgenehmigung für den FRJ-2 Anfang 2009 erteilt wird. Die Umweltverträglichkeitsuntersuchung ist durchzuführen und entsprechende Unterlagen bei der Genehmigungsbehörde einzureichen. Im Jahr 2008 wird die von der Genehmigungsbehörde einzuberufende Antragskonferenz unter Einbeziehung aller beteiligten ca. 20 Behörden festzustellen haben, ob die eingereichten Antragsunterlagen ausreichend sind. Nach eventuell notwendiger Überarbeitung der Unterlagen kann die öffentliche Auslegung stattfinden.

Die vertraglich abgesicherte Entsorgung der restlichen 98 abgebrannten Brennelemente und des stark tritiumbelasteten Schwerwassers soll 2008 erfolgen. Die 2007 begonnene Entsorgung der hochaktiven Experimentiereinschübe aus dem Reaktorblock wird fortgeführt werden.

2008 wird die Zentralabteilung Forschungsreaktoren neben der Sicherstellung des Nachbetriebs weitere Rückbauarbeiten im Rahmen der Betriebsgenehmigung durchführen und mit der Detailplanung für den Abbau der Reaktoranlage beginnen.

# Die FE-durchführenden Organisationseinheiten des FZJ

(gegliedert nach Vorstandsbereichen)

## Schlüsseltechnologien und Struktur der Materie

- Institut für Festkörperforschung (IFF)
- Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN)
- Institut für Kernphysik (IKP)
- Jülich Supercomputing Center (JSC)  
(Bis 30.09.2007 Zentralinstitut für Angewandte Mathematik (ZAM))  
inkl. John von Neumann - Institut für Computing (NIC)
- Zentralinstitut für Elektronik (ZEL)

## Energie und Umwelt

- Institut für Energieforschung (IEF)
- Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre (ICG)
- Zentralabteilung Technologie (ZAT)

## Gesundheit und Biotechnologie

- Institut für Neurowissenschaften und Biophysik (INB)
- Institut für Biotechnologie (IBT)
- Zentralabteilung für Chemische Analysen (ZCH)

## Infrastruktur

- Geschäftsbereich Sicherheit und Strahlenschutz (S)
  - Zentralabteilung Forschungsreaktoren (ZFR)
  - Zentralbibliothek (ZB) (z.K., kein FE)
-

# Institut für Festkörperforschung (IFF)

[☐ Homepage IFF](#)

## Leitung

- **Quanten-Theorie der Materialien (IFF-1)**  
Prof. Dr. Stefan Blügel
- **Theorie der weichen Materie und Biophysik (IFF-2)**  
Prof. Dr. Gerhard Gompper
- **Theorie der Strukturbildung (IFF-3)**  
Prof. Dr. Heiner Müller-Krumbhaar
- **Streumethoden (IFF-4)**  
Prof. Dr. Thomas Brückel
- **Neutronenstreuung (IFF-5)**  
Prof. Dr. Dieter Richter
- **Elektronische Materialien (IFF-6)**  
Prof. Dr. Rainer Waser
- **Weiche Materie (IFF-7)**  
Prof. Dr. Jan K.G. Dhont
- **Mikrostrukturforschung (IFF-8)**  
Prof. Dr. Knut Urban
- **Elektronische Eigenschaften (IFF-9)**  
Prof. Dr. Claus Michael Schneider

## Programmbeteiligung

### Schlüsseltechnologien

[☐ 4.2 Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen](#)

### Struktur der Materie

[☐ 5.4 Kondensierte Materie](#)

[☐ 5.5 Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen](#)

## Kurzdarstellung

Das Institut für Festkörperforschung widmet sich mit seiner Arbeit der Erforschung und dem Verständnis der Physik der Kondensierten Materie. Der wissenschaftliche Erfolg des IFF fußt maßgeblich auf dem Konzept seiner Gründer, dass neue Entdeckungen insbesondere an den Grenzen verschiedener Disziplinen entstehen. In diesem Geist hat das IFF u.a. den Weg zu neuen Forschungsfeldern wie der Spinelektronik bereitet und neue Trends in Richtung multi- und interdisziplinärer Forschung gesetzt.

Das Institut erforscht grundlegende physikalische Prinzipien und Prozesse der kondensierten Materie im festen und flüssigen Zustand. Dieser breite Hintergrund befähigt das IFF, auch in anwendungsrelevanten Forschungsrichtungen vielfältige Ideen für technologische Neuerungen zu entwickeln. Die wissenschaftlichen Herausforderungen werden entlang dreier Stoßrichtungen angegangen: (i) Untersuchung von Phänomenen der Kondensierten Materie, (ii) Durchführung materialwissenschaftlicher Studien an komplexen Systemen, (iii) Entwicklung neuer experimenteller und theoretischer Methoden und Strategien.

Die physikalische Grundlage der Forschung im IFF wird gleichermaßen durch Quantenmechanik und statistische Physik gebildet. Auf einer mikroskopischen Skala bestimmen sie die Wechselwirkung der Elektronen und atomaren Bausteine sowie ihre Reaktion auf äußere Einflüsse. Besondere Stärken des IFF liegen im Bereich der Theorie elektronischer Strukturen, der Physik von Polymeren, Kolloiden und Membranen, der Dynamik der Strukturbildung und Phasenübergänge, Phänomene und Materialien der Magneto- und Nanoelektronik, Spintronik, Hochtemperatur-Supraleitung, Elektronenmikroskopie und -spektroskopie, der Entwicklung von Instrumenten an Synchrotron- und Neutronenquellen zur detaillierten Untersuchung der Materie, sowie insbesondere auch in der engen Verzahnung der genannten Aktivitäten.

Das IFF verfügt über hochspezialisierte Labore und Einrichtungen für die Präparation von Polymeren, Kolloiden und Keramiken sowie für das Wachstum dünner Filme und Kristalle und die Synthese molekularer Strukturen. Neben der Nutzung etablierter Standardmethoden der Festkörperphysik und Materialwissenschaften werden ständig neue spezialisierte Ansätze entwickelt und eingesetzt. Diese

Techniken reichen von Supraleitungs-Mikroskopie über die Femtosekunden-Laserspektroskopie bis hin zu spinpolarisierten Elektronenspektroskopie und -mikroskopieverfahren. Das IFF betreibt im Rahmen des "Jülich Center for Neutron Science" (JCNS) in Außenstellen eine Vielfalt von State-of-the-art-Instrumenten zur Neutronenstreuung, die ständig weiterentwickelt werden. Dies umfasst Aufbauten am neuen Reaktor FRM II in München, am ILL in Grenoble, und an der Spallationsquelle SNS in Oak Ridge. Das Ernst-Ruska-Zentrum betreibt als weltweit führende Einrichtung seiner Art zwei der derzeit leistungsstärksten Transmissions-Elektronenmikroskope. Als Komplement zu den Möglichkeiten der Neutronenforschung werden auch dedizierte Geräte an den Speicherringen BESSY, HASYLAB und DELTA in Deutschland und an der APS in Argonne (USA) entwickelt und betrieben. Alle diese Einrichtungen sind zugänglich für Wissenschaftler jeder Nation.

Das IFF initiierte u.a. zwei europäische Exzellenz-Netzwerke (SOFTCOMP und CMA) und bildet einen Hauptpartner in der strategischen Allianz JARA-FIT mit der Exzellenzuniversität RWTH Aachen. Es ist darüber hinaus ein wertvoller Kooperationspartner für mehr als 100 Universitäten und Forschungsinstitute weltweit. Innerhalb Deutschlands unterhält das Institut intensive Beziehungen zu Wissenschaftlern und Forschungsgruppen in allen Teilen des Landes. Weiterhin baute das IFF in den letzten Jahren seine Position als wissenschaftlicher Kooperationspartner für große Firmen wie Bosch, Infineon, Daimler-Chrysler, Thomson, ExxonMobil, Agilent und Philips aus.

Im Geiste der Interdisziplinarität sind die Grenzen zwischen den Teilinstituten und Forschungsgruppen des IFF sehr durchlässig und erlauben vielfältige Wechselwirkungen zwischen den Bereichen der "weichen" und "harten" Materie. Auf dem Campus des Forschungszentrums existieren enge Zusammenarbeiten mit dem Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN) als weiterem Partner in JARA-FIT und dem Institut für Biologische Informationsverarbeitung (IBI), die zukünftig noch weiter ausgedehnt werden.

Zur Durchführung ihrer Arbeiten nutzen die Wissenschaftler des IFF die verschiedenen zentralen technischen Einrichtungen des Forschungszentrums Jülich und insbesondere auch das Supercomputing Center JSC. Das IFF kann weiterhin auf eine eigene hochspezialisierte technische und administrative Infrastruktur zurückgreifen, die eine wichtige Voraussetzung für das Design und die Konstruktion wissenschaftlicher Instrumente, wie z.B. Synchrotronstrahlrohre, Monochromatoren, Neutronenspektrometer, Sputtersysteme und Kristallwachstumsanlagen sind.

Das IFF führt jährlich eine international anerkannte IFF-Ferrienschule und das Laborpraktikum für Neutronenstreuung durch.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

Verleihung des Nobelpreises für Physik 2007 an Prof. Dr. Peter Grünberg (gemeinsam mit Prof. Dr. A. Fert, Paris) für die Entdeckung des Riesenmagnetowiderstands.

Weiterer Ausbau des "Jülich Center for Neutron Science" (JCNS) mit den Außenstellen am FRM II, am ILL und an der SNS. Zwei neue Projekte wurden angestoßen: In Zusammenarbeit mit der RWTH Aachen wird ein neuartiges Flugzeit-Pulver- und Texturdiffraktometer realisiert (gefördert durch die BMBF-Verbundforschung); in Zusammenarbeit mit der TU München wird ein Diffraktometer für die Biologische Strukturforschung gebaut. Inbetriebnahme weiterer Instrumente am FRM II: mit dem Spin-Echo-Spektrometer NSE, der Kleinwinkelanlage KWS 2, dem Rückstreuungsspektrometer SPHERES und dem Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse DNS sind nun vier Neutronenstreuinstrumente des JCNS im regulären Nutzerbetrieb.

Einrichtung einer HGF-Nachwuchsgruppe zum Thema "Lattice Dynamics in Emerging Functional Materials" (Herr Dr. R. Hermann).

Inbetriebnahme des Nano-Spintronics-Clusters zur Untersuchung magnetischer Nanostrukturen. Mit der Inbetriebnahme des FEI TECNAI-Transmissionselektronenmikroskops und des zweiten GATAN TRIDIEM-Elektronenspektrometers sowie der Endplanung des Neubaus wurde die zweite Ausbauphase des Ernst Ruska-Centrums (2007-2009) begonnen.

---

[Detailergebnisse: IFF Scientific Report 2007](#) (PDF, 27 MB)

[Publikationen](#)

[Patente](#)

---

# Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN)

[☞ Homepage IBN](#)

## Leitung

- **Halbleiterschichten und Bauelemente (IBN-1)**  
Prof. Dr. Detlev Grützmacher
- **Bioelektronik (IBN-2)**  
Prof. Dr. Andreas Offenhäusser
- **Grenz- und Oberflächen (IBN-3)**  
Prof. Dr. Andreas Offenhäusser (kommissarisch 08/2006 - 08/2007)  
Prof. Dr. Stefan Tautz (ab 09/2007)
- **Biomechanik (IBN-4)**  
Prof. Dr. Rudolph Merkel

## Programmbeteiligung

### Schlüsseltechnologien

[☞ 4.2 Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen](#)

### Struktur der Materie

[☞ 5.4 Kondensierte Materie](#)

## Kurzdarstellung

Das Institut für Bio- und Nanosysteme (IBN) forscht an einer breiten Palette wissenschaftlicher Projekte in den Bereichen Informationstechnologie und Kondensierte Materie. Dazu stehen im IBN eine Vielzahl von zukunftsweisenden Technologien in Kombination mit exzellentem wissenschaftlichem Personal zur Verfügung. Die Forschung des IBN ist interdisziplinär und vereint die Fachrichtungen der Physik, der Ingenieur- und der Biowissenschaften, der Chemie, sowie der Halbleitertechnologie. Kern der Arbeiten sind nanoskalige Funktionssysteme, sowohl organische wie auch anorganische.

Das IBN ist mit seinen vier Abteilungen ein international gefragter Kooperationspartner. Über 200 Gäste pro Jahr aus dem In- und Ausland nutzen das Know-how und die Infrastruktur des IBN, um Oberflächenphänomene, funktionale Nanostrukturen, biologische Systeme, Nanoelektronikschaltungen und Nanosysteme von der atomaren Skala bis zu komplexen Längenskalen zu erforschen.

Das Thema des **IBN-1** ist die Halbleiternanoelektronik im Bereich "Advanced CMOS" und "Beyond CMOS". Ziel ist die physikalische Grundlagen- und Materialforschung für innovative Bauelemente der Nanoelektronik. Die Arbeiten konzentrieren sich auf Si-Ge/Strained Silicon, III/V-Halbleiter für Höchsthäufigkeitsbauelemente und neue Materialkombinationen und Verfahren zur Selbstorganisation von Nanostrukturen.

Das **IBN-2** erforscht die Grundlagen der funktionellen Kopplung biologischer Systeme mit mikro- und nanoelektronischen Bauelementen. Dabei stehen sowohl die Verbindung von Nervensystemen mit elektronischen Bauelementen als auch der Ladungstransport in Protein-Elektroden-Systemen für die Informationsverarbeitung im Vordergrund. Zusätzlich werden Themen aus der Mikrowellen- und Terahertzsensorik bearbeitet.

Das **IBN-3** erforscht funktionale Nanostrukturen an Oberflächen mittels Rastersondenmethoden. Themen sind die Struktur und die Spektroskopie von molekularen Schichten, Architecturen und Einzelmolekülen an Oberflächen, das Wachstum und die Charakterisierung von molekularen Hybridmaterialien, der Quantentransport durch Moleküle, sowie die Prinzipien der Speicherung von Einzelelektronen in atomaren Strukturen.

Das **IBN-4** widmet sich der Erforschung von Biosystemen auf Längenskalen vom Molekül bis zur lebenden Zelle. Dabei stehen mechanische Prozesse, die von grundlegendem physiologischem Interesse und von Bedeutung für Krankheitsprozesse sind im Vordergrund. Beispiele sind Zelladhäsion, Zellbewegung und Verhalten unter äußeren Kräften. Um ein fundiertes biophysikalisches Verständnis physiologisch relevanter Prozesse zu erzielen, werden Arbeiten an lebenden Zellen und die Untersuchung biomimetischer Modellsysteme kombiniert.

Das IBN zeichnet sich aus durch die Synergie zwischen allen Teilinstituten und dem gemeinsamen kollegialen Streben nach wissenschaftlicher Erkenntnis von definierten und (nano)strukturierten Grenzflächen aus belebter und unbelebter Materie für die Praxis.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

Am 26. Januar 2007 weihte der parlamentarische Staatssekretär Herr Tomas Rachel das Sub-32nm-Labor ein. In dem Labor forscht Herr Prof. Dr. Siegfried Mantl in enger Zusammenarbeit mit der deutschen Halbleiterindustrie am Einsatz von Strained Silicon für zukünftige nanoelektronische CMOS-Bauelemente. Die Arbeitsgruppe von Herrn Prof. Dr. Siegfried Mantl wurde im September 2007 mit dem Jean-Leblanc-Preis der EU für das beste Medea-Projekt ausgezeichnet.

Für die Leitung des IBN-3 konnte seit dem 01.09.2007 Herr Prof. Dr. Stefan Tautz gewonnen werden. Unter seiner Leitung wird sich das IBN-3 weiter der Physik und der Charakterisierung von funktionalen Nanostrukturen an Oberflächen mittels Rastersondentechnologie widmen.

---

[📄 Publikationen](#)  
[📄 Patente](#)

---

# Institut für Kernphysik (IKP)

[☞ Homepage IKP](#)

## Leitung

- **Experimentelle Kernphysik I (IKP-1)**  
Prof. Dr. James Ritman
- **Experimentelle Kernphysik II (IKP-2)**  
Prof. Dr. Hans Ströher
- **Theoretische Kernphysik (IKP-3)**  
Prof. Dr. Ulf-Gerrit Meißner
- **Kernphysikalische Großgeräte (IKP-4)**  
Prof. Dr. Rudolph Maier
- **Technische und administrative Infrastruktur (IKP-TA)**

## Programmbeteiligung

### Struktur der Materie

[☞ 5.3 Physik der Hadronen und Kerne](#)

---

## Kurzdarstellung

Daorationen. Das theoretische Teilinstitut betreibt theoretische Grundlagenforschung zur Hadronenphysik und in den angrenzenden Gebieten Kern- und Elementarteilchenphysik. Der Beschleuniger COSY wird von der Abteilung Kernphysikalische Großgeräte betrieben und weiterentwickelt. Im Rahmen der Planung, Konstruktion und Fertigung von Komponenten für Detektorsysteme und den Beschleuniger gibt es eine enge Verflechtung mit der Zentralabteilung für Technologie (ZAT) und dem Zentralinstitut für Elektronik (ZEL) des FZJ.

Das Institut ist an experimentellen Aufbauten (PANDA, PAX, FLAIR) und der Planung und dem Bau des HESR im Rahmen des zukünftigen FAIR-Projekts der GSI maßgeblich beteiligt. Diese Aufgaben haben eine zentrale Bedeutung für die mittel- und langfristige Entwicklung des Institutes.

Im Rahmen des Institut für Kernphysik am Forschungszentrum Jülich arbeitet auf dem Gebiet der Hadronenphysik mit hadronischen Sonden: dazu betreibt es das Kühler-Synchrotron COSY und stellt die an COSY installierten Detektorsysteme (ANKE, EDDA und WASA am internen Strahl, sowie TOF am extrahierten Strahl) der nationalen und internationalen Nutzergemeinde für gemeinsame Experimente zur Verfügung. COSY ist ein im Rahmen der Verbundforschung des BMBF gefördertes Großgerät. Im Rahmen der programmorientierten Förderung der Helmholtz-Gemeinschaft ist das Institut gemeinsam mit der GSI und dem Forschungszentrum Karlsruhe eingebunden in das Programm "Physik der Hadronen und Kerne" innerhalb des Forschungsbereichs "Struktur der Materie".

Die experimentellen Teilinstitute betreiben die an COSY aufgebauten Detektorsysteme, entwickeln sie weiter und führen damit Experimente durch - im Allgemeinen im Rahmen von großen internationalen Kollaber programm-ungebundenen Forschung beteiligt sich das Institut am ATRAP-Experiment am AD des CERN (Erzeugung und Untersuchung von Antiwasserstoff) sowie an Experimenten zu "Exotischen Atomen" am PSI (Pionischer Wasserstoff, Deuterium).

## Ereignisse von strategischer Bedeutung

- Im Frühling 2007 hat der WASA-Detektor mit einem vom "Program Advisory Committee" genehmigten Experiment seinen Experimentbetrieb aufgenommen.
- Barrier-Bucket- und stochastische Kühlungs-Kavitäten wurden in COSY eingebaut. Damit sind die ersten Komponenten von HESR schon im Einsatz.
- Der PISA-Detektor wurde abgebaut und ans IMP-Lanzhou, China, transferiert.

---

[☞ Detailergebnisse: IKP Jahresbericht 2007](#)

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Jülich Supercomputing Centre (JSC) inkl. John von Neumann - Institut für Computing (NIC)

[☞ Homepage JSC](#)

[☞ Homepage NIC](#)

## Leitung

- Prof. Dr. Dr. Thomas Lippert

## Programmbeteiligung

### Schlüsseltechnologien

■ [4.1 Wissenschaftliches Rechnen](#)

## Kurzdarstellung

Als nationales Supercomputer-Zentrum und Kompetenzzentrum für das Wissenschaftliche Rechnen bietet das JSC unmittelbar und über das John von Neumann-Institut für Computing (NIC) der Wissenschaft und Forschung Höchstleistungsrechnerkapazität, Computermethoden und Problemlösungen an. Im Forschungszentrum ist das JSC für Planung und Realisierung, Betrieb und Einsatz der zentralen Rechner- und Serversysteme und der Campus-übergreifenden Datenkommunikationsnetze verantwortlich.

Diese Aufgabenstellungen bestimmen die FE-Arbeiten des Instituts und der NIC-Forschungsgruppe, welche vollständig im Helmholtz-Programm Wissenschaftliches Rechnen integriert sind. Die Arbeiten sind in drei Themen gegliedert. Thema 1 hat den größten Umfang und umfasst die Entwicklung und den Betrieb des Supercomputersystems als wissenschaftliches Großgerät mitsamt seiner informationstechnischen Infrastruktur für Massendaten, Breitbandkommunikation, Grid-Computing und Multimedia. In Thema 2 wird die methodische Weiterentwicklung des Supercomputings durch ein Zusammenwirken von Arbeiten in der Computersimulation, der Angewandten Mathematik und der Informatik vorangetrieben. Hier sind die Arbeiten der NIC-Forschungsgruppe "Computergestützte Biologie und Biophysik" eingeschlossen. In Thema 3 wird die Grid-Technologie weiterentwickelt, die eine stoßkantenfreie, effiziente und sichere Nutzung von verteilten Computer-Ressourcen und Daten gewährleisten soll.

Das JSC betreibt am Jahresende 2007 drei IBM-Supercomputersysteme mit einer Grenzleistung von 9+46+223 TeraFlop/s. Die Datenhaltung erfolgt in einem hierarchischen Speichersystem, das auf einem dedizierten Fileserver sowie einem robotergesteuerten Massenspeicher basiert. Der Visualisierung von Daten dienen Virtual-Reality-Systeme und ein Video-Labor. Für spezielle Aufgaben stehen Cluster-Systeme zur Verfügung.

Das JSC liefert eine Reihe von Grunddiensten, auf die sich der Betrieb der Supercomputersysteme und - bis zur Einführung einer neuen IT-Infrastruktur im Forschungszentrum - die dezentrale Datenverarbeitung abstützen. Wichtige Bereiche sind hier die Netzwerkdienste (z. B. JuNet, Wissenschaftsnetz, IT-Sicherheit, Video-Conferencing) sowie der Betrieb zentraler Server und Dienste (z. B. Backup- und Archiv-Dienste, File-Server, E-Mail-, Web-, Datenbank- und Print-Server, Accounting und Reporting, Bereitstellung von Software, Beratung).

JSC und NIC haben eine besondere Verpflichtung für die Ausbildung im Wissenschaftlichen Rechnen. Diese erfolgt durch die Ausbildung von Hochschulstudenten an der Universität Wuppertal und der RWTH Aachen, von Studenten des dualen Bachelor-Studiengangs Scientific Programming an der FH Aachen im Zuge der Ausbildung Mathematisch-technischen Softwareentwickler (IHK-Abschluss) sowie von Studenten des ebenfalls gemeinsam mit der FH Aachen angebotenen Master-Studiengangs Technomathematik. Zusammen mit der RWTH Aachen wurde die German Research School for Simulation Sciences (GRS) gegründet, die ein Master-Studium und ein Promotionsprogramm anbieten wird. Der wissenschaftliche

Nachwuchs wird außerdem in Kursen, Praktika, Seminaren, Gaststudentenprogrammen, Ferienschulen, Workshops und Konferenzen gefördert.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

- Zum 01.10.2007 wurde das "Zentralinstitut für Angewandte Mathematik ZAM)" in "Jülich Supercomputing Centre (JSC)" umbenannt. Dies geschah als Konsequenz der Tatsache, dass sich der Aufgabenschwerpunkt des Instituts seit langem hin zum Betrieb einer leistungsfähigen Supercomputer-Infrastruktur und zu einer entsprechenden methodischen und fachlichen Forschung verschoben hat.
- Im Rahmen der vorbereitenden Arbeiten zur Einrichtung einer europäischen High-Performance-Computing-Infrastruktur gründeten die deutschen nationalen Supercomputerzentren HLRS, LRZ und Jülich den "Gauss Centre for Supercomputing (GCS) e.V.". In dieser Aufstellung beteiligt man sich gemeinsam am Aufbau einer europäischen HPC-Infrastruktur. Dieser wird durch das EU-Projekt PRACE vorbereitet, das vom FZJ koordiniert wird.
- Im April 2007 nahm das von der Helmholtz-Gemeinschaft geförderte Virtuelle Institut "High-Productivity Supercomputing" die Arbeit auf. Es verbindet die am JSC angesiedelte Nachwuchsgruppe "Performance Analysis of Parallel Programs" (siehe auch Kapitel 3.1.4 "Nachwuchsgruppen") mit Instituten der RWTH Aachen, der TU Dresden und der Univ. of Tennessee. Sprecher des Virtuellen Instituts ist Prof. Dr. Felix Wolf.
- Im Rahmen der "Jülich-Aachen Research Alliance (JARA)" wurde 2007 die Sektion "Simulation Sciences (JARA-SIM)" gebildet, die eine große Zahl von Jülicher und Aachener Instituten umfasst, welche die Computer-Simulation als wesentliches Werkzeug ihrer Forschung nutzen.
- Am 30.10.2007 wurde unter maßgeblicher Beteiligung des JSC die "German Research School for Simulation Sciences GmbH (GRS)" gemeinsam vom FZJ und der RWTH-Aachen gegründet. Die GRS wird zu gleichen Teilen vom BMBF, dem MIWFT-NRW, der Helmholtz-Gemeinschaft, der RWTH und Jülich finanziert.

---

[☞ Publikationen JSC](#)

[☞ Publikationen NIC](#)

[☞ Patente](#)

---

# Zentralinstitut für Elektronik (ZEL)

[Homepage ZEL](#)

## Leitung

- Dr. Karl Ziemons (komm.)

## Programmbeteiligung

### Energie

➤ 1.2 Rationelle Energieumwandlung

➤ 1.3 Fusion

### Erde und Umwelt

➤ 2.2 Atmosphäre und Klima

➤ 2.4 Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung

### Gesundheit

➤ 3.3 Funktion und Dysfunktion des Nervensystems

### Schlüsseltechnologien

➤ 4.2 Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen

### Struktur der Materie

➤ 5.3 Physik der Hadronen und Kerne

➤ 5.5 Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen

## Kurzdarstellung

Das Zentralinstitut für Elektronik (ZEL) ist eine wissenschaftlich-technische Gemeinschaftseinrichtung des Forschungszentrums mit wichtigen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten auf dem Gebiet der analogen und digitalen Elektronik, der Mess-, Steuerungs- und Regelungstechnik, der Detektortechnik sowie der prozessorientierten Informationstechnik.

Das ZEL führt im Wesentlichen Forschungs- und Entwicklungsprojekte in Kooperation mit den Instituten des Forschungszentrums durch. Die Arbeiten beziehen sich mittelbar auf die von den Instituten formulierten Forschungsziele, wobei die wissenschaftliche Instrumentierung sowie signal- und bildgebende Systeme im Vordergrund stehen. Die Verwendung ähnlicher Systemlösungen führt zu Synergieeffekten mit erheblichen ökonomischen Vorteilen, die dem ZEL im Forschungszentrum eine besondere Bedeutung geben.

Drittmittelprojekte, national oder international geförderte Forschungsprojekte sowie Industriekooperationen begleiten den Einsatz neuartiger Technologien und den Transfer von Methoden und Systemen. Sie werden primär aus Projektmitteln finanziertem Annexpersonal bearbeitet.

Im Bereich der wissenschaftlich-technischen Infrastruktur stellt das ZEL folgende Dienste und Kompetenzen zur Verfügung:

- Planung, Ausbau und Betrieb des schnellen Datennetzwerkes "JuNet" im Forschungszentrum gemeinsam mit dem Jülich Supercomputing Centre (JSC).
- zentrale Beratung und Empfehlung bei PC-Systemen und deren Komponenten
- CAE-Entwicklungsteam für Design, Zeitanalyse und Synthese von programmierbaren Logikbausteinen
- Prototypenentwicklung und Reparaturen von Leiterplatten
- Die Einrichtung des SMD-Labors konnte mit einem modernen Vollautomaten zur Bestückung der Platinen mit kleinsten Bauteilen ergänzt werden.

Das ZEL engagiert sich im Bereich Ausbildung sowohl in der innerbetrieblichen Weiterbildung durch regelmäßig durchgeführte Kurse als auch in der Bereitstellung von Lehrstellen für verschiedene Ausbildungsberufe.

## Ereignisse von strategischer Bedeutung

Eine Findungskommission für eine Nachfolgebesetzung der Institutsleitung ist eingerichtet worden. Eine Ausschreibung in nationalen und internationalen Zeitschriften ist bereits erfolgt.

---

[☐ Publikationen](#)

[☐ Patente](#)

---

# Institut für Energieforschung (IEF)

[☞ Homepage IEF](#)

## Leitung

- **Werkstoffsynthese und Herstellungsverfahren (IEF-1)**  
Prof. Dr. Detlev Stöver
- **Werkstoffstruktur und Eigenschaften (IEF-2)**  
Prof. Dr. Lorenz Singheiser
- **Brennstoffzellen (IEF-3)**  
Prof. Dr. Detlef Stolten
- **Plasmaphysik (IEF-4)**  
Prof. Dr. Ulrich Samm, Prof. Dr. D. Reiter (komm.)
- **Photovoltaik (IEF-5)**  
Prof. Dr. Uwe Rau
- **Sicherheitsforschung und Reaktortechnik (IEF-6)**  
Prof. Reinhard Odoj
- **Systemforschung und Technologische Entwicklung (IEF-STE)**  
Jürgen-Friedrich Hake
- **Projekt Brennstoffzelle (IEF-PBZ)**  
Dr. Robert Steinberger-Wilckens
- **Projekt Kernfusion (IEF-KFS)**  
Prof. Dr. Ulrich Samm

## Programmbeteiligung

### Energie

- ☞ [1.1 Erneuerbare Energien](#)
  - ☞ [1.2 Rationelle Energieumwandlung](#)
  - ☞ [1.3 Fusion](#)
  - ☞ [1.4 Nukleare Sicherheitsforschung](#)
- ### Erde und Umwelt
- ☞ [2.6 Nachhaltige Entwicklung und Technik](#)

## Kurzdarstellung

Das **IEF-1 - Werkstoffsynthese und Herstellungsverfahren** erforscht und entwickelt Materialien, Bauteile und Komponenten für zukünftige hocheffiziente Energiewandlungssysteme. Die Aktivitäten sind fokussiert auf die Entwicklung von Schlüsselkomponenten für Feststoffelektrolyt-Brennstoffzellen (SOFC) und fortschrittliche Kraftwerke mit den Themenkomplexen Zellen sowie Kontakt- und Schutzstrukturen für SOFC, Schichtsysteme für Gasturbinen (speziell Wärmedämmschichten), Trennmembranen für künftige CO<sub>2</sub>-freie Kraftwerke. Das Institut nutzt bei den FE-Arbeiten die langjährige Expertise im Bereich der Synthese neuer Pulverwerkstoffe und deren Prozessierungsverfahren sowie der Beschichtungstechniken und greift dabei auf einen hochmodernen Maschinenpark zurück.

Das **IEF-2 - Werkstoffstruktur und -eigenschaften** führt Forschung auf dem Gebiet der Werkstoffentwicklung und Werkstoffcharakterisierung für effiziente Gas- und Dampfkraftwerke, Gastrennmembranen für CO<sub>2</sub>-freie Kraftwerke, Hochtemperaturbrennstoffzellen sowie thermisch hochbelastete Komponenten für zukünftige Fusionsanlagen durch. Die wissenschaftlichen Kompetenzfelder des IEF-2 sind die physikalisch-mechanischen Eigenschaften metallischer Hochtemperaturwerkstoffe sowie keramischer Werkstoffe, die als Strukturwerkstoffe oder als Beschichtungssysteme eingesetzt werden. Weitere Forschungsschwerpunkte sind die Untersuchung des Hochtemperaturkorrosionsverhaltens metallischer und keramischer Werkstoffe und Beschichtungssysteme sowie die Bestimmung ihrer thermochemischen Eigenschaften.

Das **IEF-3 - Brennstoffzellen** führt anwendungsbezogene Forschung und Entwicklung im Bereich der Energieumwandlungstechniken durch. Wissenschaftlich-technische Kernkompetenzfelder des IEF-3 sind Brennstoffzellen sowie Brenngaserzeugungssysteme. Die dazugehörigen FE-Aufgaben sind auf die

Realisierung von Festoxid- (SOFC), Hochtemperatur-Polymerelektrolyt- (HT-PEFC) und Direktmethanol-Brennstoffzellen (DMFC) sowie Stacks für stationäre, portable oder mobile Anwendungen bis hin zu kompletten Systemen mit Brennstoffzellen ausgerichtet. Zum anderen umfassen die verfahrens- und systemtechnischen Entwicklungen die Bereitstellung von Apparaten zur Brenngaserzeugung aus Mitteldestillaten (Diesel, Kerosin und Heizöl). Die Arbeiten werden von auslegungsbestimmenden Modellierungen und Simulationen, Analysemethoden zur Auflösung von Strukturwirkungsbeziehungen sowie verfahrens- und systemanalytischen Studien begleitet.

Das **IEF-4 - Plasmaphysik** nimmt teil an der international betriebenen Kernfusionsforschung, die mit ihren Experimentieranlagen in den vergangenen Jahrzehnten bewiesen hat, dass sie die physikalischen Prinzipien zur Zündung des Fusionsfeuers heute kennt. Der in weltweiter Kooperation gestartete Bau des 500-Megawatt-Experimentalreaktors ITER soll erstmals die Energiefreisetzung aus Fusion im großen Maßstab demonstrieren und die Entwicklung eines wirtschaftlichen Dauerbetriebs im Kraftwerksmaßstab ermöglichen. Das Forschungsprogramm des Instituts orientiert sich an der Strategie des europäischen Forschungsprogramms (Assoziation EURATOM-FZJ und European Fusion Development Agreement EFDA). Es konzentriert sich auf Fragen der Plasmawandwechselwirkung und daraus abgeleiteter und zugehöriger Fragen der Plasmadiagnostik und auch der Werkstoffentwicklung. Das Programm wird auf nationaler Ebene zwischen den Helmholtz-Zentren Max-Planck-Institut in Garching, Forschungszentrum Karlsruhe und Forschungszentrum Jülich abgewickelt. Im Drei-Länder-Eck existiert das Trilaterale Euregio-Cluster, bei dem sich FZJ mit belgischen und niederländischen Zentren zusammengefunden hat, um Ressourcen zu bündeln und um vorteilhaft unterschiedliche und sich ergänzende Expertisen zusammen zu bringen. Die wichtigsten experimentell genutzten Einrichtungen sind die Tokamaks TEXTOR und JET (England). Auch zum Bau des Stellarator WENDELSTEIN 7X in Greifswald liefert das Institut einen wichtigen Beitrag und beteiligt sich am Aufbau und an der späteren wissenschaftlichen Nutzung des Stellarators.

Das **IEF-5 - Photovoltaik** untersucht die Grundlagen und Technologie für effiziente und preisgünstige Dünnschichtsolarmodule aus Silizium. Die Arbeiten umfassen das gesamte Spektrum der Forschung und Entwicklung von Materialforschung über Prozess- und Solarzellenentwicklung bis hin zur Demonstration von industrierelevanten Herstellungsverfahren. Sie konzentrieren sich auf die Entwicklung von Stapelsolarzellen aus amorphen und mikrokristallinen Siliziumlegierungen mit einer auf das ganze Sonnenspektrum angepassten spektralen Empfindlichkeit. Für diese Solarzellen werden zudem transparente, leitfähige Kontaktschichten sowie Reflektorschichten entwickelt, die durch ihre Mikrotextur für einen effektiven Lichteinfall sorgen. Ein zusätzliches Potenzial für die Kostensenkung resultiert aus niedrigeren Prozesstemperaturen, kostengünstigeren Substraten, neuen Ansätzen im Bereich der Modultechnologie und aus neuen Konzepten aus der Nano-Optik.

Das **IEF-6 - Sicherheitsforschung** und Reaktortechnik bearbeitet grundlegende Forschungs- und Entwicklungsarbeiten innerhalb des HGF-Programms "Nukleare Sicherheitsforschung". Die Arbeiten zur Weiterentwicklung der kerntechnischen Anlagen beziehen sich auf bestehende und innovative Konzepte für Reaktoren, Fusionsanlagen, Entsorgungseinrichtungen und Transmutationsanlagen mit dem Ziel, mögliche Schadensauswirkungen extrem unwahrscheinlicher Störfälle für die Bevölkerung zu minimieren. Dazu werden theoretische und experimentelle Untersuchungen zur Absicherung der selbsterhaltenden Integrität derartiger Anlagen durchgeführt. Im Bereich nukleare Entsorgungsforschung werden Wege und Möglichkeiten zur schadlosen Verwertung oder sicheren Beseitigung der radioaktiven Stoffe gesucht. Im Mittelpunkt stehen die Charakterisierung radioaktiver Abfälle (hier auch die Produktkontrollstelle PKS) für das Bundesamt für Strahlenschutz (BFS), die Behandlung und Lagerung radioaktiver Stoffe und die chemische Abtrennung langlebiger Radionuklide für die Kernumwandlung. Hierfür stehen Heiße Zellen und Radionuklidlabore zur Verfügung.

Viele Fragen, die im Mittelpunkt des öffentlichen Interesses stehen, betreffen gleichzeitig technische, wirtschaftliche und ökologische Teilsysteme und können nur durch eine interdisziplinäre energiewissenschaftliche Systemanalyse behandelt werden. Die Gruppe **Systemforschung und Technologische Entwicklung (IEF-STE)** nimmt sich dieser Herausforderung an, indem sie langfristige Merkmale der Versorgung und Nachfrage in Energiesystemen untersucht. Dies geschieht in einem ganzheitlichen, interdisziplinären Ansatz, welcher der Vernetzung von Energietechniken mit ökonomischen, ökologischen und sozialen Systemen Rechnung trägt und damit die Versorgungssicherheit, die Wirtschaftlichkeit und den Umweltschutz in den Blick nimmt. Diese dreifache Strategie orientiert sich an sozialen bzw. politischen Leitbildern wie das der Nachhaltigen Entwicklung. In diesen Themenfeldern untersucht IEF-STE die Folgen technischer Entwicklungen und erarbeitet wissenschaftliche Entscheidungshilfen für Politik und Wirtschaft. Die Arbeit basiert auf einer methodischen Weiterentwicklung von Instrumenten zur Systemanalyse und ihrer Anwendung sowie auf der Zusammenarbeit zwischen Wissenschaftlern verschiedener Einrichtungen.

Die **Projektleitung Brennstoffzelle (IEF-PBZ)** koordiniert die Arbeiten zur Hochtemperatur-Brennstoffzelle (SOFC) in und zwischen den beteiligten Instituten (IEF-1/-2/-3 und ZAT, sowie ZCH, ZEL und IEF-STE). Weiterhin vertritt IEF-PBZ das Projekt nach innen und außen und stimmt z.B. im Rahmen des HGF-Programms die Brennstoffzellen-Aktivitäten ab. Kontakte zur Industrie werden aufgebaut, in bi- und multi-lateralen Vorhaben formalisiert und gepflegt. IEF-PBZ initiiert Anträge für Forschungsvorhaben bei der EU und den Bundesministerien und hält die dazugehörigen Kontakte. IEF-PBZ koordiniert das europäische integrierte Projekt Real-SOFC und vertritt die SOFC-Aktivitäten des Forschungszentrums inhaltlich und programmatisch in nationalen und europäischen Gremien.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

Nach der Entscheidung des Vorstands, die Arbeiten zur Nuklearen Sicherheitsforschung in Jülich über das Jahr 2009 hinaus fortzuführen, hat im März 2007 eine Strukturkommission für das IEF-6 getagt. Die Kommission unter Vorsitz des HGF-Programmsprechers empfiehlt eine Neuausrichtung und Fokussierung der Institutsarbeiten auf die drei Themenschwerpunkte Nukleare Systeme, Brennstoffkreislauf und Nukleares Abfallmanagement mit Modellierung / High-Performance-Computing als Querschnittsaufgabe. Basis der zukünftigen Arbeiten ist die geplante Einrichtung von drei neuen kerntechnischen Professuren an der RWTH Aachen (inverse Jülicher Modelle, einschließlich Nachfolge Prof. Kugeler) und die Wiederbesetzung der Stelle Prof Odoj (Jülicher Modell).

Im Mai 2007 fand eine zentreninterne Zwischenbegutachtung des Forschungsbereichs Energie (ohne Kernfusion) und der bislang im Forschungsbereich Erde und Umwelt angesiedelten Energiesystemanalyse unter besonderer Berücksichtigung der strategischen Wirkung in Hinblick auf die Helmholtz-Programme statt. Das international besetzte Gremium bestätigte die strategische Ausrichtung der Arbeitsgebiete sowie die im Programmverlauf erzielten Fortschritte und die wissenschaftliche Exzellenz der durchgeführten Arbeiten.

Basierend auf einem Additional-Funding-Projekt aus der PoF 1 und mit der Einwerbung der Helmholtz-Allianz MEM-BRAIN im Jahr 2007 wurde ein neues Arbeitsgebiet im IEF etabliert, welches sich der Material- und Komponentenentwicklung von gastrennenden keramischen/ metallischen Membranen widmet, mit dem Ziel, der Realisierung eines CO<sub>2</sub>-freien, fossilen Kraftwerkes ein Stück näher zu kommen. Die Arbeiten zu diesem Programm sollen entsprechend eines Beschlusses des Helmholtz-Senats alsbald in die HGF-Grundfinanzierung überführt werden.

---

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Institut für Chemie und Dynamik der Geosphäre (ICG)

[☐ Homepage ICG](#)

## Leitung

- **Stratosphäre (ICG-1)**  
Prof. Dr. Martin Riese
- **Troposphäre (ICG-2)**  
Prof. Dr. Andreas Wahner
- **Phytophäre (ICG-3)**  
Prof. Dr. Ulrich Schurr
- **Agrosphäre (ICG-4)**  
Prof. Dr. Harry Vereecken
- **Sedimentäre Systeme (ICG-5)**  
Dr. Andreas Lücke (kommissarisch)

## Programmbeteiligung

### Erde und Umwelt

- ☐ [2.1 Geosysteme: Erde im Wandel](#)
- ☐ [2.2 Atmosphäre und Klima](#)
- ☐ [2.4 Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung](#)

## Kurzdarstellung

Die fünf Teilinstitute des ICG bilden das Umweltprogramm des Forschungszentrums Jülich. Ziel dieses Programms ist ein verbessertes quantitatives Verständnis von Prozessen in den zentralen Kompartimenten der Biogeosphäre: Sedimente, Boden, Biosphäre, Troposphäre und Stratosphäre. Die interdisziplinäre Forschung des ICG konzentriert sich auf Schlüsselfragen innerhalb dieser Kompartimente sowie Wechselwirkungen zwischen den Kompartimenten. Ein detailliertes Verständnis der Biogeosphäre als System ist die wesentliche Voraussetzung für die Vorhersage natürlicher und anthropogener Änderungen sowie für die Entwicklung geeigneter Anpassungsmaßnahmen.

Atmosphärische Spurengase und Aerosole bestimmen die Luftqualität und beeinflussen den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und damit das Klima. Ziel der Arbeiten von **ICG-1 (Stratosphäre)** und **ICG-2 (Troposphäre)** im Programm "Atmosphäre und Klima" ist ein quantitatives Verständnis der chemischen Umwandlungs- und Transportprozesse von Spurengasen und Aerosolen sowie der Bildung von Wolken. Die Arbeiten unterteilen sich in die beiden Programmthemen "Spurenstoffe in der Troposphäre (PT3)" und "Stratosphäre und Tropopausenbereich im globalen Wandel (PT4)". Schwerpunkt der Arbeiten des ICG-1 ist die stratosphärische Ozonschicht und deren Wechselwirkung mit Klimaänderungen. In der Tropopausenregion werden die Faktoren mit der größten Wirkung auf den Strahlungshaushalt der Atmosphäre und somit auf das Klima untersucht: die Spurengase Wasserdampf und Ozon, sowie Aerosole und Wolken. Für die Untersuchungen werden Messgeräte für Forschungsflugzeuge (z. B. GEOPHYSICA) und Forschungsballons entwickelt und im Rahmen internationaler Messkampagnen eingesetzt. Zudem gewinnt die Analyse von Satellitendaten an Bedeutung. Die Auswertung sämtlicher Messdaten erfolgt in Kombination mit Computersimulationen der Erdatmosphäre (z. B. CLaMS). Der klimarelevante Tropopausenbereich ist die Schnittstelle zum ICG-2, welches Langzeitbeobachtungen von Wasserdampf, Ozon und Stickoxiden von kommerziellen Flugzeugen im Rahmen des europäischen Projekts MOZAIC durchführt. Die Arbeiten des ICG-2 haben zum Ziel, das Grundlagenwissen über die stoffliche Zusammensetzung und den Zustand der Troposphäre zu verbessern. Die Forschung basiert auf der experimentellen Analyse und der Modellierung der Photochemie in der unteren Troposphäre. Die Luftchemie biogener und anthropogener Emissionen sowie die heterogenen Reaktionen an Aerosolen sind zentrale Themen. Messungen von Radikalen und Spurengasen in Bezug auf Strahlungsqualität und -intensität in der Atmosphären-Simulationskammer SAPHIR und in Feldkampagnen (bodengebunden und unter Einsatz des Zeppelin NT in der planetarischen Grenzschicht) sind eng verknüpft mit Modellierung und Simulation. Das neue Atmosphärenforschungsflyzeug HALO wird eine bedeutende Rolle für die zukünftigen

Forschungsaktivitäten von ICG-I und ICG-II in folgenden Forschungsgebieten spielen: Oxidationsfähigkeit der Atmosphäre, Wasserbudget in der oberen Troposphäre und Stratosphäre, Stratosphären-Troposphären-Austausch. Beide Organisationseinheiten werden sich substantiell an der HALO Instrumentierung beteiligen.

Das **ICG-3 (Phytosphäre)** analysiert die dynamische Reaktion von Pflanzen auf ihre sich zeitlich und räumlich variable Umwelt als Basis von Stresstoleranz, Anpassung und Fitness von Pflanzen. Die Forschungsarbeiten liefern damit einerseits Grundlagen zum Verständnis von Adaptationsprozessen der Vegetation an den Klimawandel, andererseits werden Untersuchungen durchgeführt, wie nachhaltig produzierte Pflanzen als Basis für Rohstoffe und Energie in einer zukünftigen Bioökonomie genutzt werden können. Dabei spielt die Steuerung von Wachstum und Metabolismus der Pflanze von der molekularen bis zur Bestandesebene eine essentielle Rolle. In Pflanzen bestimmen Transport- und Wachstumsprozesse die Stoffflüsse und werden durch ihre Struktur-Funktionsbeziehungen und Wechselwirkung mit der Umwelt beeinflusst. Austauschprozesse zwischen Pflanze und Atmosphäre haben wesentlichen Einfluss auf die pflanzliche Aktivität und die Luftchemie. Wurzel-Boden-Wechselwirkungen verknüpfen pflanzliche Leistung mit Bodenprozessen. Die Forschung in diesen Bereichen identifiziert Kontrollprozesse, mit denen Pflanzen effizient räumlich und zeitlich verteilte Ressourcen akquirieren können. Zur Erfassung der Dynamik von Pflanze(n) und Umwelt werden nicht-invasive Methoden eingesetzt. Dazu gehören unter anderem weltweit für die Pflanzenforschung einmalige Einrichtungen wie Positronenemissions-Tomographie von Pflanzen (PLANTIS) und Magnetresonanztomographie (MRI), die fortentwickelt werden. Unter anderem finden diese Arbeiten in den beiden Virtuellen Instituten "Biotische Interaktionen (ViBi)" und "Portable NMR (VI-P NMR)", die vom ICG-3 koordiniert werden, in enger Kooperation mit nationalen und internationalen Wissenschaftlern statt.

Die Forschung des **ICG-4 (Agrosphäre)** zielt auf das Verständnis von Speicher-, Filter-, Puffer-, Abbau- und Inaktivierungsfunktionen von Böden und Sedimenten/Grundwasserleitern ab. Die Forschungsarbeiten konzentrieren sich auf die Charakterisierung von natürlichem organischen Material (NOM) in Beziehung auf Struktur-Aktivitätsbeziehungen und Pool-Stabilitäten zur besseren Interpretation ihrer Funktion in und zwischen Kompartimenten, auf Methoden zum Verständnis und zur Quantifizierung der Auswirkung physikalischer, chemischer und biologischer Heterogenität auf Boden/Grundwasserleiter- und Sedimentfunktionen auf verschiedenen Skalen. Mathematische Modelle und nicht-invasive Methoden werden entwickelt, um Massenflüsse von Wasser, Kohlenstoff und Schadstoffen auf Feld- bis Hof- und Regionalebene vorherzusagen. Bedeutende Fortschritte wurden in der Entwicklung und Anwendung nicht-invasiver Methoden insbesondere auf dem Gebiet der elektrischen Widerstandstomographie, der spektral induzierten Polarisation zur Bestimmung von hydraulischen Eigenschaften und Transportstrukturen sowie bei der Entwicklung von Ground Penetrating Radarverfahren erzielt. Im Rahmen der Modellierungsaktivitäten koordiniert das ICG-4 das Virtuelle Institut "INVEST", welche sich mit der inversen Modellierung terrestrischer Systeme beschäftigt. Das ICG-4 koordiniert das Helmholtz Observatorien-Netzwerk TERENO und betreibt hierin das Observatorium "Rur-Einzugsgebiet". Die Initiative MORES zur Kooperation bei der Modellierung regionaler Systeme im Forschungsbereich Erde und Umwelt wird ebenfalls vom ICG-4 koordiniert. Die Modellierungsaktivitäten sind über zwei gemeinsame W2-Professuren (Hydrogeophysik, Modellierung terrestrischer Systeme) mit der RWTH-Aachen in Rahmen von JARA-SIM und der GRS eingebunden.

Die Mitarbeiter des **ICG-5 (Sedimentäre Systeme)** wurden im Laufe des Jahres 2007 in die Institute ICG-1 bis -4 versetzt und tragen von dort bis Ende der POF-1 zum Programm "Geosysteme: Erde im Wandel" bei. Die Arbeiten in diesem Programm konzentrieren sich auf die Analyse und Interpretation von Klimavariabilität und deren Einfluss auf die Umweltkompartimente. Schnelle Veränderungen und Extremereignisse des Klimas stehen im Mittelpunkt des Forschungsinteresses. Die Studien folgen im Wesentlichen zwei Linien: Einerseits werden Rekonstruktionen des Klimas anhand von Informationen aus einem weltweiten Netzwerk von Klimaarchiven aus lakustrinen Sedimenten und Baumstandorten durchgeführt. Andererseits werden Rezentstudien durchgeführt, um Transferfunktionen zu entwickeln und zu testen, welche die eindeutige Übersetzung von Proxies in quantitative Umweltdaten ermöglichen. Hierfür werden spezielle Seen der Eifel und Bäume an ausgewählten Standorten regelmäßig beprobt. Diese Aktivitäten werden durch Untersuchungen am derzeit größten verfügbaren Forstlysimeter, über Gewächshausuntersuchungen und Laborexperimente an Algenkulturen unterstützt. Die Entwicklung neuer Klimaproxies und ausgefeilter Isotopenanalyse-Techniken sind wesentliche Aufgaben zur Verbesserung der Möglichkeiten der Klimarekonstruktion.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

In der POF-2 werden die Institute ICG-1 und -2 im zukünftigen Programm 3 "Atmosphäre und Klima" gemeinsam mit dem FZK und dem GFZ ihre Forschungsarbeiten fortsetzen. Durch die Zusammenführung

der POF-1-Programme 4 "Biogeosysteme" und 5 "Nachhaltige Nutzung von Landschaften" im Rahmen der POF-2 werden ICG-3 und -4 zukünftig ihre Arbeiten im neuen Programm 4 "Terrestrische Umwelt" gemeinsam mit UFZ und HMGU durchführen. Das Thema Paläoklima wird in POF-2 von seiten des FZJ nicht mehr weitergeführt, und die Arbeiten werden zukünftig in der Helmholtz Gemeinschaft vom GFZ geleistet.

---

[☞ Publikationen](#)

under construction:

[☞ Patente](#)

---

# Zentralabteilung Technologie (ZAT)

[🏠 Homepage ZAT](#)

## Leitung

- Dr. Ralph Sievering

## Programmbeteiligung

### Energie

➡ [1.2 Rationelle Energieverwendung](#)

➡ [1.3 Fusion](#)

### Erde und Umwelt

➡ [2.2 Atmosphäre und Klima](#)

➡ [2.4 Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung](#)

### Struktur der Materie

➡ [5.3 Physik der Hadronen und Kerne](#)

➡ [5.4 Kondensierte Materie](#)

➡ [5.5 Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen](#)

---

## Kurzdarstellung

Spitzenforschung in einem Forschungszentrum ist heute nur noch mit Forschungsgeräten möglich, deren Messergebnisse in Bezug auf Datenmenge, Auflösung und Genauigkeit das bisher Mögliche deutlich übertreffen. Solche Ergebnisse sind nur mit Geräten und Anlagen zu erzielen, die speziell für die jeweilige Forschungsaufgabe konzipiert worden sind und die häufig die Grenze des technisch Machbaren erreichen. Zur Realisierung solcher Geräte ist der Einsatz modernster Technologien auf zahlreichen Gebieten erforderlich. Deshalb benötigt ein Forschungszentrum wie das in Jülich eine wissenschaftlich-technische Infrastruktur, die in der Lage ist, derartigen Anforderungen gerecht zu werden.

Die ZAT entwickelt solche wissenschaftliche Experimentiergeräte und führt die hierzu notwendigen FE-Arbeiten durch. Das Leistungsspektrum der ZAT reicht von der Konzeption über die Projektbearbeitung und Herstellung bis zur Inbetriebnahme. Die ZAT arbeitet bei diesen Aufgaben mit der Industrie zusammen und bildet in vielen Fällen das Bindeglied zwischen den wissenschaftlichen Instituten des Forschungszentrums und Industriefirmen. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, betreibt die ZAT eine ständige Entwicklung bzw. Weiterentwicklung von Geräten, Komponenten, Verfahren und Technologien. Dies geschieht in intensiver Zusammenarbeit mit Hochschulen und Universitätsinstituten sowie mit Industriefirmen und Verbänden.

Die Kompetenzen der ZAT sind programmübergreifend. Kernkompetenzen sind Vakuumtechnik, Kryotechnik, Fügetechnik, dynamische Systeme sowie magnetische Systeme und Antriebstechnik. Die Stärke der ZAT liegt einerseits in der Verwirklichung eines Gesamtprozesses von der Konzeptfindung bis zur Inbetriebnahme aus einer Hand und andererseits in der Kombination der genannten Kompetenzen.

## Ereignisse von strategischer Bedeutung

Zurzeit wird eine Kooperationsvereinbarung vorbereitet, die eine enge Kooperation zwischen Forschungszentrum und RWTH Aachen auf dem Gebiet der Fügetechnik sicherstellen soll.

---

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Institut für Neurowissenschaften und Biophysik (INB)

[☐ Homepage INB](#)

## Leitung

- **Zelluläre Biophysik (INB-1)**  
Prof. Dr. U. Benjamin Kaupp
- **Molekulare Biophysik (INB-2)**  
Prof. Dr. Georg Büldt, Prof. Dr. Dieter Willbold
- **Medizin (INB-3)**  
Prof. Dr. K. Zilles, Prof. Dr. Dr. P.A. Tass, Prof. Dr. G.R. Fink
- **Nuklearchemie (INB-4)**  
Prof. Dr. Heinz. H. Coenen
- **Programmgruppe Mensch, Umwelt, Technik (INB-MUT)**  
Dr. Peter Wiedemann

## Programmbeteiligung

### Erde und Umwelt

[☐ 2.6 Nachhaltige Entwicklung und Technik](#)

### Gesundheit

[☐ 3.3 Funktion und Dysfunktion des Nervensystems](#)

## Kurzdarstellung

Das Institut für Neurowissenschaften und Biophysik (INB) gliedert sich in fünf Organisationseinheiten, deren wissenschaftliche Aktivitäten von der Grundlagenforschung (zelluläre Signalverarbeitung (INB-1) und biologische Strukturforchung (INB-2)) über die Entwicklung neuer Methoden zur Bildgebung (MRT und PET) am lebenden Gehirn (INB-3, INB-4) bis zur Entwicklung neuer Diagnose- und Therapieverfahren für neurologische und psychiatrische Erkrankungen (INB-3) reichen. Chancen und Risiken wissenschaftlicher und technischer Entwicklungen werden von der Arbeitsgruppe INB-MUT bearbeitet.

Die "**Zelluläre Biophysik**" (INB-1, vormals IBI-1) betreibt Forschung auf dem Gebiet der Zellbiologie, zellulären Signalverarbeitung und neuer molekularer Imagingmethoden. Dabei werden untersucht: die Erregung und Adaptation von Sinneszellen der Netzhaut, molekulare Ursachen für degenerative Erkrankungen der Netzhaut und die Organisation der Retina, der Mechanismus der Signalentstehung und -übertragung in Riechzellen und Geschmackszellen und molekulare Mechanismen der Chemotaxis von Spermien.

Ein thematischer Schwerpunkt des Instituts ist die Charakterisierung von Ionenkanälen und Rezeptoren mit biochemischen, molekularbiologischen und biophysikalischen Methoden. Methodisch wurden in den vergangenen Jahren neue hoch-empfindliche Fluoreszenzverfahren (Einzelmolekül-Fluoreszenz-Spektroskopie) entwickelt, die für die neuro- und zellbiologische Forschung von unschätzbarem Wert sind.

Ziel der Arbeiten in der Molekularen Biophysik (INB-2, vormals IBI-2) ist es, die Funktionsweise von Proteinen und Proteinkomplexen, die am Signal- und Stofftransport oder an enzymatischen Reaktionen beteiligt sind, auf der Basis ihrer Struktur und Dynamik zu verstehen. Untersuchungsmethoden sind die Proteinkristallographie, die mehrdimensionale NMR und die zeitaufgelöste UV/Vis- und Infrarotspektroskopie. So wird in einem Projekt die Signalübertragung von einem bakteriellen sensorischen Rhodopsin auf das nächste Molekül in der Signalkette mit atomarer Auflösung verfolgt. Neben vielen anderen Projekten wird das INB-2 in Zukunft, besonders in Zusammenarbeit mit INB-1, Ionenkanäle untersuchen, die in vielen Systemen die Umsetzung einer sensorischen Kaskade in ein elektrisches Signal bewirken. Die Kristallstruktur eines Proteins liefert nur einen Schnappschuss der in der Zelle ablaufenden Prozesse. Ein vollständiges Verstehen erfordert, dass man die zellulären Prozesse zeitlich und räumlich verfolgen kann. Deshalb entwickelt das Institut bildgebende Verfahren, um die Strukturänderungen vom Einzelmolekül über den Proteinkomplex bis hin zu Zellverbänden zu untersuchen. Es kommen insbesondere hochempfindliche Fluoreszenz-Verfahren zum Einsatz.

INB-1 und INB-2 untersuchen auch die molekularen Ursachen für verschiedene degenerative und funktionelle Erkrankungen der Netzhaut und des Nervensystems. Das INB-2 untersucht die molekularen Ursachen für verschiedene degenerative Erkrankungen des Nervensystems ("Alzheimer" und Prionerkrankungen).

Zwei Projekte beschäftigen sich mit der Diagnose der Alzheimerschen Demenz (AD). Es werden spezifische molekulare Sonden entwickelt, um Amyloid-Ablagerungen im lebenden Gehirn mittels Imaging zu detektieren. Zusätzlich wird an einer neuen ultrasensitiven Methode zur Frühdiagnose der Alzheimerschen Demenz gearbeitet, die  $\beta$ -Amyloid-Aggregate in Körperflüssigkeiten (wie z.B. Blut und Liquor) quantitativ nachweisen soll. Neben diesen diagnostischen Ansätzen werden auch therapeutische und präventive Möglichkeiten zur gezielten Manipulation der Amyloid-Ablagerungen untersucht.

Proteine, die eine wichtige Rolle am vesikulären Transport in Neuronen und bei der Autophagie spielen, werden auch als wichtige Faktoren für die Verhinderung oder Entstehung neurodegenerativer Krankheiten diskutiert. Ein wichtiges Projekt des INB-2 beschäftigt sich mit der Rolle des GABARAP in Neuronen. GABARAP spielt eine essentielle Rolle für die Funktion des GABAA-Rezeptors und wechselwirkt mit einer ganzen Reihe weiterer neuronaler Proteine.

Weitere Untersuchungsobjekte des INB-2 sind virale Proteine (aus HIV und SARS-CoV) und ihre zellulären Zielproteine. Die Proteine HIV-Vpu und HIV-Nef interagieren mit dem humanen CD4. Darüber hinaus interagiert Nef mit verschiedenen SH3-Domänen und trägt vermutlich unter anderem zu der Entstehung der HIV assoziierten Demenz (HAD) bei.

Ziel der wissenschaftlichen Arbeiten in der "**Medizin**" (INB-3 vormals IME) ist es, die normale oder durch neurologische oder psychiatrische Erkrankungen veränderte Struktur und Funktion des Gehirns zu verstehen, um neue präventive, diagnostische und therapeutische Ansätze zu entwickeln. Dieses Ziel wird in drei Forschungsschwerpunkten verfolgt:

- Analyse der molekularen (Verteilung und Funktion von Transmitterrezeptoren im Gehirn, Aufnahme von Aminosäuren in Tumorzellen), zellulären (Struktur und Funktion zentraler Synapsen, Mikroschaltkreise der Hirnrinde) und systemischen (neurale Mechanismen der Kognition, Architektur der Hirnrinde, pathologische Synchronisation, anatomische Konnektivitätsanalyse) Mechanismen des Gehirns. Die in-vivo-Untersuchungen am Menschen und Tiermodellen werden von in-vitro und post-mortem-Untersuchungen begleitet
- Entwicklung neuer Verfahren des Neuroimaging (PET; MRT; fMRT; MEG) für neurologisch-psychiatrische Fragestellungen. Die PET-Entwicklungen finden in enger Kooperation mit der Nuklearchemie (INB-4) statt. In Kooperation mit dem ZEL wird die Entwicklung und Evaluierung eines hochauflösenden und -sensitiven PET-Systems für Tierimaging durchgeführt. Im MRT-Bereich konzentriert sich die Entwicklung auf Methoden im Höchstfeld-Bereich, quantitative MRT-Methoden und Natrium-Imaging. Im MEG-Bereich wurden neue Verfahren zur Lokalisation zerebraler Stromdichten und zur Feedback-Stimulation mittels MEG-online-Analyse entwickelt.
- Analyse komplexer neuraler Systeme im Gehirn von Patienten mit Dysfunktion nach Schlaganfall, hepatischer Enzephalopathie, M. Parkinson, Hirntumor, Aufmerksamkeits-Defizit-Hyperaktivitäts-Syndrom (ADHS) oder Schizophrenie v.a. durch autoradiographische, elektrophysiologische und Neuroimaging-Methoden. Ein Schwerpunkt ist die Entwicklung neuer Therapieformen (Hirnschrittmacher; behaviorales Training bei Patienten mit Neglect). Diese translationale Strategie wird durch die klinische Forschungsbettenstation und die Vernetzung mit den umliegenden Universitätskliniken verstärkt.

In der "**Nuklearchemie**" (INB-4 vormals INC) werden Forschungs- und Entwicklungsarbeiten durchgeführt, die den Einsatz kern- und radiochemischer Methoden erfordern und auf Anwendungen von Radionuklidtechniken in Chemie und Lebenswissenschaften zielen. Die Arbeiten gliedern sich in drei Schwerpunkte:

- Radionuklidentwicklung: Entwicklung medizinisch relevanter Radionuklide, insbesondere Positronenstrahler. Dies umfasst die Messung von nuklearen und Kernreaktions-Daten sowie technische und radiochemische Entwicklungen von Bestrahlungstargets und Apparaturen zur Optimierung der Radionuklidproduktion für medizinische Zwecke.
- Radiopharmazeutische Chemie mit Radiotracerentwicklung und -herstellung; Entwicklung neuer Radiotracer insbesondere von Liganden für zerebrale Rezeptoren sowie Aminosäuren für die Hirntumordiagnostik. Die Radiotracerherstellung schließt die Automatisierung von Radiosynthesen und die Entwicklung von schnellen Qualitätskontrollmethoden ein, um die Verfügbarkeit neu entwickelter sowie eingeführter Radiotracer für die PET-Studien im INB-3 sicherzustellen. Auch wurden Forschungssubstanzen der Pharmaindustrie für PET-Untersuchungen am Menschen mit C-11 markiert.

- Radiopharmakologie: Präklinische Evaluation neuer Radiotracer im Hinblick auf die Erfassung (patho-)physiologischer Prozesse. Methoden müssen hinsichtlich der kurzen Halbwertszeit und geringer Massen der Tracer adaptiert bzw. neu entwickelt werden. Untersuchungen der Metabolisierung und Rezeptor-Bindung werden mit radioanalytischen und bildgebenden Verfahren sowie Tierverteilungsstudien durchgeführt und ggf. durch Studien an Primaten zusammen mit dem INB-3 ergänzt.

Die **Programmgruppe Mensch, Umwelt, Technik (INB-MUT** vormals MUT) untersucht Chancen und Risiken wissenschaftlicher und technischer Entwicklungen und fokussiert auf drei Schwerpunkte:

- Management von Innovationen: Entwicklung von Konzepten für das Management und die gesellschaftlich sinnvolle Nutzung von Chancen, die aus wissenschaftlich-technischen Innovationen und Schlüsseltechnologien entstehen.
- Umgang mit Unsicherheit: Analyse der wissenschaftlichen Bewertung von Gesundheits- und Umweltrisiken auf der einen Seite und ihrer intuitiven Bewertung durch die Öffentlichkeit auf der anderen Seite.
- Öffentlichkeit, Politik und Massenmedien: Analyse der Verwendung wissenschaftlicher Expertise bei der gesellschaftlichen Meinungsbildung zu Fragen von Wissenschaft, Technik und Umwelt sowie öffentlicher Konflikte bei wissenschaftlich-technischer Innovationen.

### **Ereignisse von strategischer Bedeutung**

- Im Rahmen der Umstrukturierung des Forschungszentrums Jülich werden die Institute INB-1 und INB-2 in den Bereich Schlüsseltechnologien wechseln und den Gesundheitsbereich verlassen. Das INB-2 wird dann eine Brückenfunktion zwischen den beiden Forschungsbereichen einnehmen und sich sowohl in der Gesundheit als auch in den Schlüsseltechnologien in der zweiten Runde der PoF beteiligen.
- Jörg Enderlein (INB-1) nahm einen Ruf auf eine W3 Professur an die Universität Tübingen an. Er verließ das Forschungszentrum Jülich.
- U. Benjamin Kaupp (INB-1) nahm einen Ruf als Wissenschaftlicher Direktor der Abteilung für Molekulare Neurosensorik am Forschungszentrum Caesar in Bonn an. Er blieb dem Forschungszentrum zunächst jedoch noch als kommissarischer Leiter des INB-1 erhalten.
- Arnd Baumann (INB-1) wurde die Bezeichnung "Außerplanmäßiger Professor" von der Universität Köln verliehen.
- Valentin Gordelij (INB-2) erhielt einen Ruf auf eine W2-Professur an die RWTH Aachen und nahm diesen an. Er wird zukünftig eine Arbeitsgruppe am INB-2 leiten. Zudem erhielt er einen W3 äquivalenten Ruf der CEA am IBS in Grenoble, den er ablehnte.
- Henrike Heise erhielt einen Ruf auf eine W2-Professur an die Universität Düsseldorf ins Institut für Physikalische Biologie und nahm diesen an. Sie wird zukünftig eine Arbeitsgruppe am INB-2 leiten.
- Peter A. Tass nahm einen Ruf auf eine W3-Professur für Neuromodulation (Leiter des Forschungsschwerpunkts Neuromodulation an der Klinik für Stereotaxie und Funktionelle Neurochirurgie, Universität zu Köln) an. Er wurde zudem zum Direktor für den Teilbereich Neuromodulation am INB-3 benannt.
- Als Bestandteil der Exzellenzinitiative der Bundesregierung und auf der Basis des Rahmenvertrags zur Jülich-Aachen Research Alliance (JARA) wurde im Herbst 2007 die Sektion JARA-BRAIN gegründet und nahm mit Bestellung der zwei Direktoren ihre operative Tätigkeit auf. In JARA-BRAIN sollen im Zusammenspiel von Grundlagenforschung, klinischer Forschung und Methodenkompetenz des Forschungszentrums Jülichs und der RWTH Aachen neue Strategien zur Vorbeugung, Diagnose und Therapie psychischer und neurologischer Hirnerkrankungen entwickelt werden.

---

[📄 Publikationen](#)  
[📄 Patente](#)

---

# Institut für Biotechnologie

[☞ Homepage IBT](#)

## Leitung

- IBT-1 Prof. Dr. Hermann Sahm, seit 15.11.2007: Prof. M. Bott
- IBT-2 Prof. Dr. Christian Wandrey

## Programmbeteiligung

keine HGF-Programmbeteiligung (Landesfinanzierung NRW)

[☞ zur FE-Vorhabensbeschreibung "Biotechnologie"](#)

## Kurzdarstellung

Die Entwicklung biotechnologischer Verfahren zur Herstellung von (Fein)-Chemikalien, wie z.B. Vitaminen und Aminosäuren, Pharmaprodukten und Proteinen sowie die Etablierung der mikrobiellen Systembio(tech)nologie stehen im Mittelpunkt der FE-Arbeiten des Instituts für Biotechnologie. Diese Forschungs- und Entwicklungsarbeiten umfassen sowohl grundlagenorientierte als auch anwendungsbezogene Themen. Als Biokatalysatoren werden Mikroorganismen, insbesondere Bakterien, sowie isolierte Enzyme eingesetzt. Um die Syntheseleistungen dieser verschiedenen biologischen Systeme gezielt verbessern zu können, z.B. durch "metabolic engineering" und "protein design", sind umfangreiche Untersuchungen zum Stoffwechsel und dessen Regulation sowie zur Struktur und Funktion von Enzymen erforderlich. Dazu werden modernste Technologien wie Transkriptomics, Proteomics, Metabolomics oder Fluxomics eingesetzt. Ferner werden reaktionstechnische und verfahrenstechnische Arbeiten für eine möglichst optimale Nutzung der Mikroorganismen und Enzyme ausgeführt.

## Ereignisse von strategischer Bedeutung

Das IBT-1 und IBT-2 und zwei Institute der Universität Düsseldorf (Institut für Molekulare Enzymtechnologie und Institut für Bioorganische Chemie - auf dem Gelände des Forschungszentrums Jülich) koordinieren ihre wissenschaftlichen Arbeiten in einem Zentrum für Mikrobielle Biotechnologie (ZMB), das sich insbesondere mit Forschungs- und Entwicklungsaufgaben auf dem Gebiet der Weißen Biotechnologie beschäftigt. Ein die Modalitäten regelnder Vertrag wurden von den Partnern unterzeichnet. Herr Prof. Dr. Michael Bott hat den Ruf auf die Leitung des IBT-1 angenommen und ist seit dem 15. November 2007 im Amt. Die Berufungsverhandlungen mit dem Kandidaten, der den Ruf auf die Leitung des IBT-2 erhalten hat, waren bis Ende des Jahres 2007 noch nicht abgeschlossen.

---

[☞ Detailergebnisse](#)

[☞ Publikationen](#)

[☞ Patente](#)

---

# Zentralabteilung für Chemische Analysen (ZCH)

[📄 Homepage ZCH](#)

## Leitung

- Dr. Stephan Küppers

## Programmbeteiligung

### Energie

➤ 1.2 Rationelle Energieverwendung

➤ 1.3 Fusion

### Erde und Umwelt

➤ 2.1 Geosystem: Erde im Wandel

➤ 2. Biogeosysteme: Dynamik und Anpassung

### Gesundheit

➤ 3.3 Funktion und Dysfunktion des Nervensystems

### Schlüsseltechnologien

➤ 4.2 Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen

---

## Kurzdarstellung

Die ZCH ist analytischer Dienstleister für das Forschungszentrum Jülich. Die ZCH engagiert sich bei analytischen Fragestellungen, die über längere Zeit für mehr als eine OE des Forschungszentrums von Interesse sind, ein hohes Maß an Spezialkompetenz im Bereich der Analytik benötigen, und häufig hohe Investitionen in Geräte/Anlagen/Gebäude erfordern.

Bei solchen Fragestellungen erbringt die ZCH einen Mehrwert für das Forschungszentrum durch einen effizienten Ressourceneinsatz. Derzeit betätigt sich die ZCH auf drei Kompetenzfeldern:

- Analytik von Elementen über den gesamten Konzentrationsbereich unabhängig von der Probenmatrix,
  - vollständige Charakterisierung von Oberflächen und Schichtsystemen,
  - Struktur und Zusammensetzung organischer Substanzen (z.B. Metabolitenaufklärung).
- 

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Geschäftsbereich Sicherheit und Strahlenschutz (S)

[🏠 Homepage S](#)

## Leitung

- Dr. Reinhard Lennartz

## Programmbeteiligung

### Energie

[📄 1.4 Nukleare Sicherheitsforschung](#)

### Erde und Umwelt

[📄 2.2 Atmosphäre und Klima](#)

## Kurzdarstellung

Der Geschäftsbereich Sicherheit und Strahlenschutz (S) ist für die Durchführung aller Sicherheitsaufgaben zuständig, die von zentraler Stelle wahrgenommen werden müssen. Aufgabengemäß gliedert sich S in die Bereiche Genehmigung, Betrieblicher Strahlenschutz, Messtechnik, Umgebungsüberwachung, Arbeitsschutz und Objektsicherung. Die Vorbereitung von Notfallschutzmaßnahmen gehört ebenfalls zum Aufgabenspektrum der Abteilung.

Im Rahmen der Beteiligung an den FE-Vorhaben "Nukleare Sicherheitsforschung" und "Atmosphäre und Klima" leistet S u. a. einen Beitrag zur Weiterentwicklung numerischer und messtechnischer Methoden für den Strahlen- und Umweltschutz.

---

[📄 Publikationen](#)

[📄 Patente](#)

---

# Zentralabteilung Forschungsreaktoren (ZFR)

[☞ Homepage ZFR](#)

## Leitung

- Dr. Gunter Damm

## Programmbeteiligung

### Struktur der Materie

[☞ 5.5 Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen](#)

## Kurzdarstellung

Die seit der endgültigen Abschaltung des Forschungsreaktors FRJ-2 andauernde Nachbetriebsphase wurde mit Kostenreduzierprogrammen weiter fortgesetzt, wobei vor allem zu nennen sind: Personalreduzierung der Zentralabteilung auf 70% der ursprünglichen Stärke, Neuausrichtung der Zentralabteilung auf den von Vorstand und Aufsichtsrat zugestimmten Rückbau des FRJ-2 in Eigenregie, Aufnahme von zukünftig auszubauenden Forschungszentrums internen und externen kerntechnischen Serviceleistungen, Strom- und Wasserverbrauchsreduzierungen sowie zahlreiche weitere Einzelmaßnahmen.

Bis Ende 2007 waren alle Neutronenstreuinstrumente aus Reaktorhalle und Neutronenleiterlabor ausgebaut. Dabei wurden ca. 450 t Material radiologisch bewertet und in der neu angeschafften Freimessanlage freigemessen und aus dem Reaktorbereich abgegeben.

Im April 2007, also nur ein Jahr nach der endgültigen Abschaltung, wurde der Antrag auf "Stilllegung und Abbau der Reaktoranlage FRJ-2 und seiner Hilfs- und Nebenanlagen" gestellt. Bis Ende 2007 wurden der Sicherheitsbericht dazu, eine Kurzfassung und alle 20 notwendigen Detailberichte in Eigenregie der Zentralabteilung Forschungsreaktoren fertig gestellt. Zusätzlich wurde in Zusammenarbeit mit dem Bereich Sicherheit und Strahlenschutz der Bericht entsprechend Artikel 37 des EURATOM-Vertrages erarbeitet.

---

[☞ Patente](#)

---

# Zentralbibliothek (ZB)

[📄 Homepage ZB](#)

## Leitung

- Dr. Rafael Ball

---

## Kurzdarstellung

Die Zentralbibliothek (ZB) realisiert als innovativer Informationsdienstleister die umfassende und hochwertige Literatur- und Informationsversorgung für die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Forschungszentrums.

Der Bibliometrie-Service der ZB konnte wichtige Impulse für die Kooperation im Bereich Wissenschaft und Forschung geben. Im Auftrag des Internationalen Büros beim DLR wurde die "Bibliometrische Analyse zum wissenschaftlichen Output von Indien" für das BMBF erstellt. Diese Analyse unterstützte die inhaltliche Planung der Indien-Reise der Forschungsministerien Dr. Schavan im Frühjahr 2007. Eine weitere bibliometrische Länderanalyse mit Schwerpunkt "Südamerika", ebenfalls beauftragt durch das Internationale Büro, gab Hinweise auf potentielle Kooperationspartner im Bereich FuE in den Ländern Südamerikas. Bei der Realisierung des EU-Projektes "SMART: Foresight Action for Knowledge Based Multifunctional Materials Technology" war der Bibliometrie-Dienst mit einer Analyse zu den Hot Topics im Bereich Materialwissenschaften beteiligt. Die Projektergebnisse wurden in der Publikation "Future Perspectives in European Materials Research" dokumentiert, die im Verlag des Forschungszentrums veröffentlicht wurde.

Die enge Zusammenarbeit mit den Wissenschaftler/innene/n im Forschungszentrum Jülich hat einen hohen Stellenwert für die Arbeit der Zentralbibliothek. Im Frühjahr 2007 führte die Bibliothek eine Online-Benutzerumfrage unter den Kunden im Forschungszentrum durch. Die Umfrage wurde in Kooperation mit dem Institut für Bibliothekswissenschaft der Humboldt-Universität Berlin durchgeführt. Die Resonanz war sehr positiv: Umfang und Aktualität der elektronischen Informationsangebote sowie die zahlreichen Service-Angebote der Bibliothek wurden von den Kunden mit der Note sehr oder gut bewertet.

Die Zentralbibliothek ist als einzige deutsche Bibliothek als Mitglied in der internationalen Developer-Group des "Institutes of Scientific Information". Sie nimmt somit Einfluss auf die Weiterentwicklung wichtiger Fachdatenbanken wie dem "Web of Knowledge". Im Frühjahr 2007 fand eine Marketing-Studie mit Wissenschaftler/innene/n des Forschungszentrums statt, die von der ZB begleitet wurde.

Im Rahmen eines Open-Innovation-Projektes wurde die "Chemie-Bibliothek", ein web-basiertes Informationsportal zu chemiespezifischen Fragestellungen, in Kooperation mit Wissenschaftlern im Forschungszentrum gestaltet.

Im Jahr 2007 wurde das elektronische Informationsangebot auf rund 1.200 elektronische Zeitschriften und mehr als 5.000 E-Books ausgebaut. Dafür wurden Mittel in Höhe von rund 1,4 Mio. Euro eingesetzt. Durch die Beteiligung an Einkaufsgemeinschaften mit anderen Bibliotheken (Konsortien) konnte dabei der Zugang zu weiteren 800 E-Journals ohne weitere Kosten für das Forschungszentrum realisiert werden. Für die Beschaffung von Dokumenten (Fernleihe) wurden im selben Zeitraum rund 34.000 EUR gezahlt, aufgrund der aktuellen Entwicklung des Urheberrechts ist hier mit höheren Ausgaben in den nächsten Jahren zu rechnen.

Zu Beginn des Jahres 2008 trat ein neues Urheberrecht in Kraft, das unter anderem mit Änderungen der Nutzungsrechte für ältere Publikationen (Erscheinungsjahr: 1966 bis 1995) verbunden ist. Auf Initiative der Zentralbibliothek konnte fristgerecht (Ende 2007) das einfache Nutzungsrecht für zahlreiche Online-Publikationen Jülicher Autoren an das Forschungszentrum übertragen werden. In der Folge konnte JUWEL, der Open Access Server des Forschungszentrums, erheblich ausgebaut werden und beinhaltet aktuell ca. 3.300 Dokumente (Stand: April 2008) und damit 30% mehr Dokumente als im Vorjahr.

[📄 Publikationen](#)

## Tabellarische Übersichten und Downloads (PDFs)

- ☞ [Publikationen 2007](#) (Gesamtliste)
- ☞ [Publikationsstatistik 2007](#)
- ☞ [Beteiligung der FZJ-Institute an den Helmholtz-Programmen bzw. FZJ-FE-Vorhaben lt. FE-Programm 2007](#)