

# FORSCHUNG

FÜR MENSCH UND UMWELT

Jahresbericht 2003



Forschungszentrum  
Rossendorf

---

## IMPRESSUM

FZR - Jahresbericht 2003

Herausgeber: Forschungszentrum Rossendorf  
Vorstand

Schriftenreihe: Wissenschaftlich-Technische Berichte  
FZR-398  
März 2004  
ISSN 1437-322X

Konzeption & Redaktion: Dr. Christine Bohnet, FZR

Gestaltung und Layout: WA Claus Preußel, Coswig

Druck: Druckerei Thieme, Meißen

Abrufbar unter: <http://www.fz-rossendorf.de>

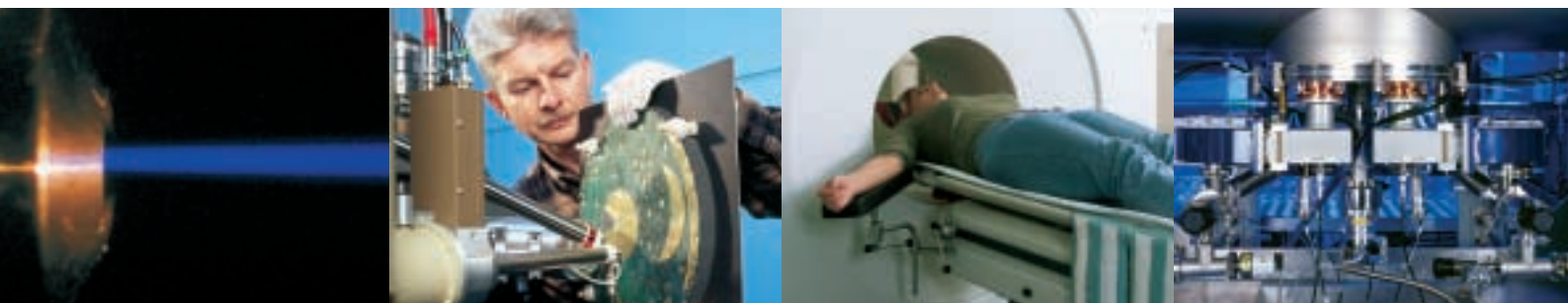
Zu beziehen bei: Forschungszentrum Rossendorf  
Öffentlichkeitsarbeit  
Bautzner Landstr. 128  
01328 Dresden

Zusätzlich zum FZR-Jahresbericht 2003 in Deutsch sind „Annual Reports“ der fünf FZR-Institute sowie der Zentralabteilung Strahlungsquelle ELBE erhältlich.

### **Titelbild:** Gasblasen in einer Rohrleitung

In den Rohrleitungen technischer Anlagen spielen Mehrphasenströmungen häufig eine wichtige Rolle. Bei hohen Durchsätzen können Gasblasen in einer Flüssigkeitsströmung ungewöhnliche Formen und Dimensionen annehmen. Hinter einem Gasgehalt von weit über 50% (links) verbirgt sich eine über 600 mm hohe Großblase (rechts), die den Querschnitt der großen vertikalen Teststrecke von TOPFLOW, der neuen Versuchsanlage des Instituts für Sicherheitsforschung, fast völlig einnimmt. Im Schnittbild (Mitte) wird die komplizierte Struktur der Strömung sichtbar (s. S. 10-21).

# Inhalt



- 3 Vorwort**
- 4 Profil**  
Forschungsprogramm | Großgeräte
- Forschung**
- 8 TOPFLOW - eine Mehrzweckversuchsanlage für die Modellentwicklung von Zweiphasenströmungen**
- 24 Atomkerne im Photonenstrahl**  
Erste kernphysikalische Experimente mit Bremsstrahlung am Beschleuniger ELBE
- 33 Ein Weg und viele Ziele**  
Die molekularen Mechanismen des Sehens geben Aufschluss über allgemeine Prinzipien der zellulären Signalverarbeitung
- 41 Die Welt der vernachlässigten Dimensionen**  
Kolloide in der Umwelt - Kolloidgetragener Schadstofftransport
- 53 Proteinoxidation und Krankheit**
- 63 Schätze im Protonenlicht**  
Zerstörungsfreie Vorsorgeuntersuchung an Glaspnetiosen
- 73 Ereignisse**  
Personalien | Preise | Termine
- 78 Bildung**  
Schüler und Lehrer | Ausbildung im FZR  
Tanz der Elemente | Tag der offenen Tür
- 82 Standortentwicklung**
- 84 Daten und Fakten**  
Organe und Gremien | Überblick
- 88 Organigramm**



## Vorwort

Zwei herausragende Ereignisse prägten das Jahr 2003 im Forschungszentrum Rossendorf: die Einweihung und Inbetriebnahme der Thermohydraulik-Großversuchsanlage TOPFLOW im Institut für Sicherheitsforschung (s. dazu den entsprechenden Beitrag im Kapitel Forschung) und die Grundsteinlegung für das Hochfeldlabor Dresden, ein Projekt, das bei der Evaluation durch den Wissenschaftsrat im Jahr zuvor ganz hervorragend abschneiden konnte. Mit den beiden neuen Großgeräten TOPFLOW und Hochfeldlabor Dresden werden auch neue Forschungsthemen und Gesichter im Forschungszentrum einziehen. So rechnen wir bald mit der Besetzung der Direktorenstelle für das Hochfeldlabor Dresden, weil wir neben dem Großgerät für die Erzeugung hoher gepulster Magnetfelder auch ein neues Institut aufbauen.

Im Rückblick war 2003 ein Jahr mit großen und einer Vielzahl kleinerer Ereignisse (s. Kapitel Ereignisse), mit Fortschritten und Veränderungen, sowohl in der Wissenschaft wie auch in der Entwicklung des Forschungsstandortes. Fünf Institute (bald werden es sechs sein), sechs Großgeräte (davon eines im Aufbau), zwei Zentralabteilungen und drei Projektgruppen bilden das solide Gerüst für die wissenschaftliche Arbeit im Zentrum. Über die Inhalte wurde 2003 bei der Einführung und Umsetzung von Programmbudgets im Rahmen einer programmorientierten Forschung, wie von den Zuwendungsgebern gefordert, intensiv diskutiert. Als Ergebnis konnten die drei Forschungsprogramme „Struktur der Materie“, „Lebenswissenschaften“ und „Umwelt und Sicherheit“ (s. Kapitel Profil) präzisiert und neue Schnittpunkte zwischen den Programmen und zwischen den Instituten formuliert werden.

Für den in den letzten 40 Jahren entstandenen Forschungsstandort - ein großer Campus mit einer beinahe verwirrenden Vielzahl von Gebäuden - wurde 2003 ein Masterplan entwickelt, der einen Planungshorizont von mehr als 10 Jahren überstreicht und dessen Ziele in der Verkleinerung des betreuten Areals, der behutsamen und ökonomisch sinnvollen Sanierung alter Gebäudesubstanz und in der Herausbildung eines attraktiven Zentrums liegen (Näheres dazu unter Standortentwicklung).

Das Forschungszentrum Rossendorf hat sich 2003 zudem ein neues Erscheinungsbild gegeben. Das neue blaue Logo, angelehnt an den ebenfalls neu gestalteten Auftritt der Leibniz-Gemeinschaft, soll unsere Zugehörigkeit und Nähe unterstreichen. Das neue Corporate Design ist darüber hinaus aber auch Ausdruck eines veränderten Verständnisses, denn wir wollen Wissenschaft in zeitgemäßer Form kommunizieren. Ein, wie wir finden, gelungenes Beispiel hierfür ist unser neuer Internet-Auftritt (<http://www.fz-rossendorf.de>).

Alles in allem war 2003 ein lebendiges und dynamisches Jahr, aber es hielt auch besondere Herausforderungen vor dem Hintergrund knapp werdender Finanzmittel für uns bereit. Zu den Entwicklungsbedingungen für die Forschung in Deutschland im Allgemeinen gesellte sich eine Diskussion, die uns Leibniz-Institute im Speziellen betraf. Erinnerung sei hier an die im letzten Jahr aufgeflammete „Entflechtungsdebatte“.

An dieser Stelle bedanken wir uns bei unseren Zuwendungsgebern, Gremien und all unseren Kooperationspartnern für die gute Zusammenarbeit im vergangenen Jahr und freuen uns auf die gemeinsamen Aufgaben und Projekte der Zukunft.

## Forschungsprogramme

### Materialforschung mit Ionen

Forschungsvorhaben

Dünne Schichten

Ionen-Festkörper-Wechselwirkung

Nanostrukturen

### Halbleiterphysik

Forschungsvorhaben

Materialien für die Optoelektronik

Dotierung und Defekte in Halbleitermaterialien

Nanostrukturen

### Subatomare Physik

Forschungsvorhaben

Kernspektroskopie

Nukleare Astrophysik

Seltene hadronische Prozesse

## Profil

### Forschungsprogramme | Großgeräte

Das FZR betreibt anwendungsorientierte Grundlagenforschung auf den Gebieten **Struktur der Materie, Lebenswissenschaften sowie Umwelt und Sicherheit**. Diese drei eng miteinander verflochtenen Forschungsprogramme werden unteretzt durch **Programmbereiche und Forschungsvorhaben**, die im Folgenden in Kürze vorgestellt werden.

#### Struktur der Materie

Im Forschungszentrum Rossendorf sind zwei europaweit einzigartige Laboratorien für die Strukturforschung angesiedelt: das Ionenstrahlzentrum mit seiner großen Zahl von Anlagen und Geräten zur Behandlung und Analyse von Materialoberflächen sowie die Strahlungsquelle ELBE mit vielfältigen Bestrahlungsmöglichkeiten mit Elektronen, Photonen, Neutronen und Positronen sowie einem Freie-Elektronen-Laser.

Mit dem Werkzeug des Strahls können die Materialforscher in Rossendorf einerseits Hochleistungswerkstoffe sowie Materialien für die Halbleitertechnologie entwickeln und verbessern und andererseits Strukturen auf der Nano- bis Femto-Meter-Skala untersuchen (ein Nanometer entspricht einem Millionstel Millimeter, ein Femtometer ist nochmals um den Faktor 1000 kleiner als ein Nanometer).

Die Anwendung von Ionen, geladenen Teilchen, ist vielfältig. Oberflächen erhalten durch sie neue oder verbesserte Funktionen und es können optimale Mikro- und Nanostrukturen in Halbleitermaterialien erzeugt werden. Weitere Anwendungen sind neuartige Lichtemitter oder elektronische Speicher, die in Zukunft die Produkte aus der Mikroelektronikindustrie entscheidend verändern können. Sogar wertvolle Kunstwerke und teure Unikate aus der Industrie können zerstörungsfrei untersucht werden (siehe den Beitrag „Schätze im Protonenlicht“ in der Rubrik Forschung).

Grundlagenforschung auf dem Gebiet der subatomaren Struktur der Materie führt zu neuen Erkenntnissen über den Aufbau der Atomkerne und ihrer Bausteine, den Hadronen, aber auch zur Entstehung und Entwicklung der chemischen Elemente im Kosmos. Die ausgefeilten Experimentiermethoden der Kernphysik an den Elektronen- und Ionen-Beschleunigern stimuliert nicht zuletzt die Medizintechnik bei der Entwicklung neuer Diagnose- und Therapieverfahren.

### Radiopharmazie

Forschungsvorhaben

Radiotracer in der Tumor- und Stoffwechselforschung

Radiometall-Therapeutika

PET in der Arznei- und Lebensmittelforschung

### Biostrukturen und Strahlung

Forschungsvorhaben

Strahlungsinduzierte Zellschädigung

Strukturdynamik von Biomolekülen

Tomographie und tumorkonforme Radiotherapie

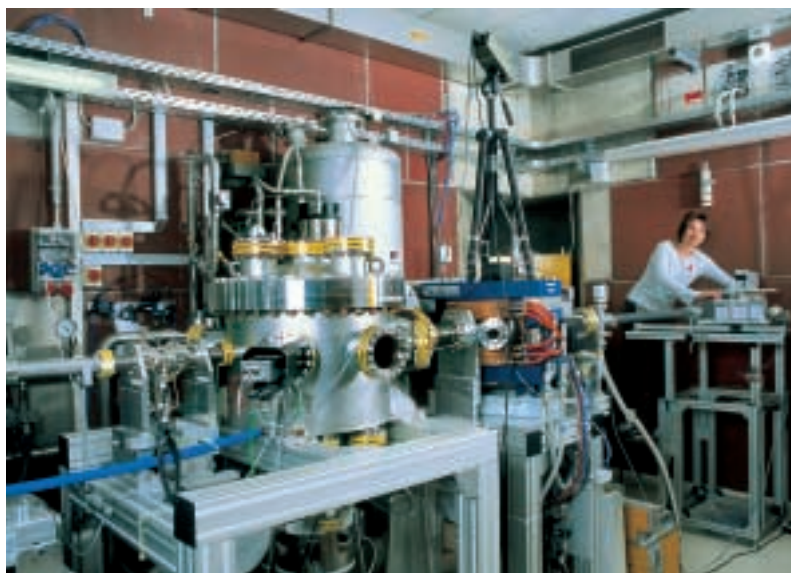
### Lebenswissenschaften

Ein in den Körper injiziertes radioaktives Arzneimittel gibt dem Arzt durch seine Strahlung wichtige diagnostische Informationen, ohne dass ein Eingriff in den Körper nötig ist. Dem FZR steht ein Zyklotron zur Verfügung, mit dem spezielle Radionuklide (Positronen-Strahler) erzeugt werden. Die daraus im PET-Zentrum hergestellten radioaktiven Arzneimittel werden am Patienten für die Untersuchung von Stoffwechselfvorgängen oder von Tumorerkrankungen und Hirnleistungsstörungen angewendet (PET = Positronen-Emissions-Tomographie).

Von zunehmender Bedeutung ist die Ausrichtung der PET auf die Arznei- und Lebensmittelforschung. Hier sind Fragen von Interesse wie: Wo genau und wie wirken Arzneimittel oder Lebensmittelinhaltsstoffe im Körper? Wie verteilen sie sich und wie werden sie wieder ausgeschieden? Die Antworten hierauf erweitern die Möglichkeiten zur Beurteilung von Risiko und Nutzen der untersuchten bioaktiven Substanzen im Organismus.

Forschungen zum Thema Biostrukturen und Strahlung zielen auf die Entschlüsselung der fundamentalen Prozesse zwischen Strahlung und Biomolekülen sowie auf ein besseres Verständnis der Wirkung von Strahlung auf Zellen und Gewebe. Dieses Wissen hilft dabei, sichere Grenzwerte bei der diagnostischen und therapeutischen Anwendung von Röntgenstrahlen festzulegen. Daneben geht es darum, die grundlegende Funktionsweise von Biomolekülen besser zu verstehen. Zukunftsweisend ist zudem die Entwicklung neuartiger Verfahren für die Krebsdiagnostik und -therapie, wobei die genaue Kontrolle von deren Nebenwirkungen eine besondere Rolle spielt.

Von der Strahlungsquelle ELBE wird der Elektronenstrahl im Vakuum zur Erzeugungskammer (in der Mitte des Bildes) geführt, in der sich ein Diamantkristall zur Erzeugung von quasimonochromatischer Röntgenstrahlung befindet. Die Röntgenstrahlung dient strahlenbiologischen Untersuchungen.



**Anlagen- und Reaktorsicherheit**

Forschungsvorhaben

Störfallanalyse von Kernreaktoren

Material- und Komponentensicherheit

Teilchen- und Strahlungstransport

Sicherheit und Effektivität chemischer Prozesse

**Thermofluiddynamik**

Forschungsvorhaben

Magnetohydrodynamik

Thermofluiddynamik von Mehrphasensystemen

**Radioökologie**

Forschungsvorhaben

Aquatische Chemie der Actiniden

Wechselwirkung von Actiniden mit Festphasen

Actiniden in Biosystemen

Reaktiver Transport von Actiniden

Spektroskopische Speziationsmethoden

**Großgeräte****Umwelt und Sicherheit**

Dieses Forschungsprogramm ist dem Schutz von Mensch und Umwelt vor den Risiken technischer Aktivitäten gewidmet. Ein Schwerpunkt ist die Bewertung und Minderung von Gefahren, die sich aus dem Betrieb von Kernkraftwerken ergeben. Zu diesem Zweck wird untersucht, wie sich Kernreaktoren bei Störfällen verhalten. Insbesondere ist es wichtig zu zeigen, dass der Reaktorkern in jedem Fall gekühlt werden kann und dass die radioaktiven Substanzen in den Brennstäben eingeschlossen bleiben.

Der Kernbrennstoffkreislauf ist zudem mit radioökologischen Fragen verbunden: wie können radioaktive Abfälle sicher entsorgt und wie die Altlasten aus dem Uranerzbergbau saniert werden? Dazu ist es notwendig, die Transportmechanismen der radioaktiven Elemente in unserer Umwelt und die Wechselwirkung mit Pflanzen und Bakterien aufzuklären. So kann man z. B. die Überlebensstrategien von Bakterien nutzen, um Uran aus dem Sickerwasser von Abraumhalden herauszufiltern.

Das Programm schließt ferner die Sicherheitsanalyse exothermer chemischer Reaktionen und die Entwicklung umweltfreundlicher Technologien ein. Durch die Anwendung von Magnetfeldern können Prozesse mit elektrisch leitfähigen Flüssigkeiten in der Kristallzüchtung, der Metallurgie und der Elektrochemie effizienter gestaltet und die Produktqualität verbessert werden. Ergebnisse aus der Grundlagenforschung, z.B. zur Erklärung des Erdmagnetfeldes, fließen so unmittelbar in die industrielle Anwendung ein.

Die zum Teil unikalen Forschungseinrichtungen, wie z. B. die radiochemische Beamline ROBL, die Thermohydraulik-Versuchsanlage TOPFLOW und die MHD-Labors machen die ausführenden Arbeitsgruppen zu begehrten Partnern in der nationalen und internationalen Kooperation.

Das Forschungszentrum Rossendorf betreibt derzeit fünf Großgeräte, die auch Kooperationspartnern von Universitäten und Unternehmen der Wirtschaft zur Verfügung stehen. Das sechste Großgerät, das Hochfeldlabor Dresden, befindet sich im Aufbau.

**Strahlrohr ROBL**

Das FZR verfügt über ein eigenes Rossendorfer Strahlrohr ROBL am europäischen Synchrotron (ESRF) in Grenoble/ Frankreich. An den dortigen zwei Messplätzen wird zum einen die Mikrostruktur von Werkstoffen untersucht (Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung) und zum anderen die Wechselwirkung von unter radioökologischen Gesichtspunkten interessanten Metallverbindungen mit Gesteinen (s. hierzu den Beitrag des Instituts für Radiochemie auf den Seiten 42 - 51 in diesem Band).



### **Ionenstrahlzentrum**

Das Rossendorfer Ionenstrahlzentrum vereinigt eine exzellente Ausstattung zur Erzeugung unterschiedlicher Ionenstrahlen und langjährige Forschungsexpertise. Das Kompetenzzentrum für die Anwendung von Ionenstrahlen in der Materialforschung sowie zur Modifizierung und Analyse von Festkörperoberflächen verfügt über Plasma- und Ionenanlagen, die Ionen mit Energien zwischen 10 Elektronenvolt und 50 Millionen Elektronenvolt liefern (Anwendungen mit dem an Luft ausgeführten Protonenstrahl werden im Beitrag „Schätze im Protonenlicht“, Seiten 64 - 71, beschrieben).

### **Strahlungsquelle ELBE**

Der Elektronenstrahl des supraleitenden Elektronenbeschleunigers ELBE (**E**lektronenbeschleuniger mit hoher **B** Brillanz und geringer **E**mittanz) wird zur Erzeugung von vielfältiger Sekundärstrahlung genutzt. Gamma-, Röntgen-, Neutronen- und Positronenstrahlung sowie die ferne und mittlere Infrarotstrahlung der Freien-Elektronen-Laser können für einzigartige Forschungen auf den Gebieten Physik, Chemie, Biologie, Medizin und Materialforschung genutzt werden (s. hierzu auch den Artikel „Atomkerne im Photonenstrahl“, Seiten 24- 31).

### **PET-Zentrum**

Das medizinische Forschungs- und Diagnose-Zentrum für Positronen-Emissions-Tomographie (PET) wird gemeinsam mit dem Universitätsklinikum der TU Dresden betrieben. Hier können Stoffwechselvorgänge im Körperinneren mit dem bildgebenden Verfahren PET dargestellt werden. Im Berichtszeitraum konnte die Ausstattung durch ein Micro-PET - ein hochauflösender PET-Tomograph für kleine Versuchstiere - komplettiert werden (s. hierzu den Beitrag des Instituts für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie, Seiten 54 - 60).

### **TOPFLOW**

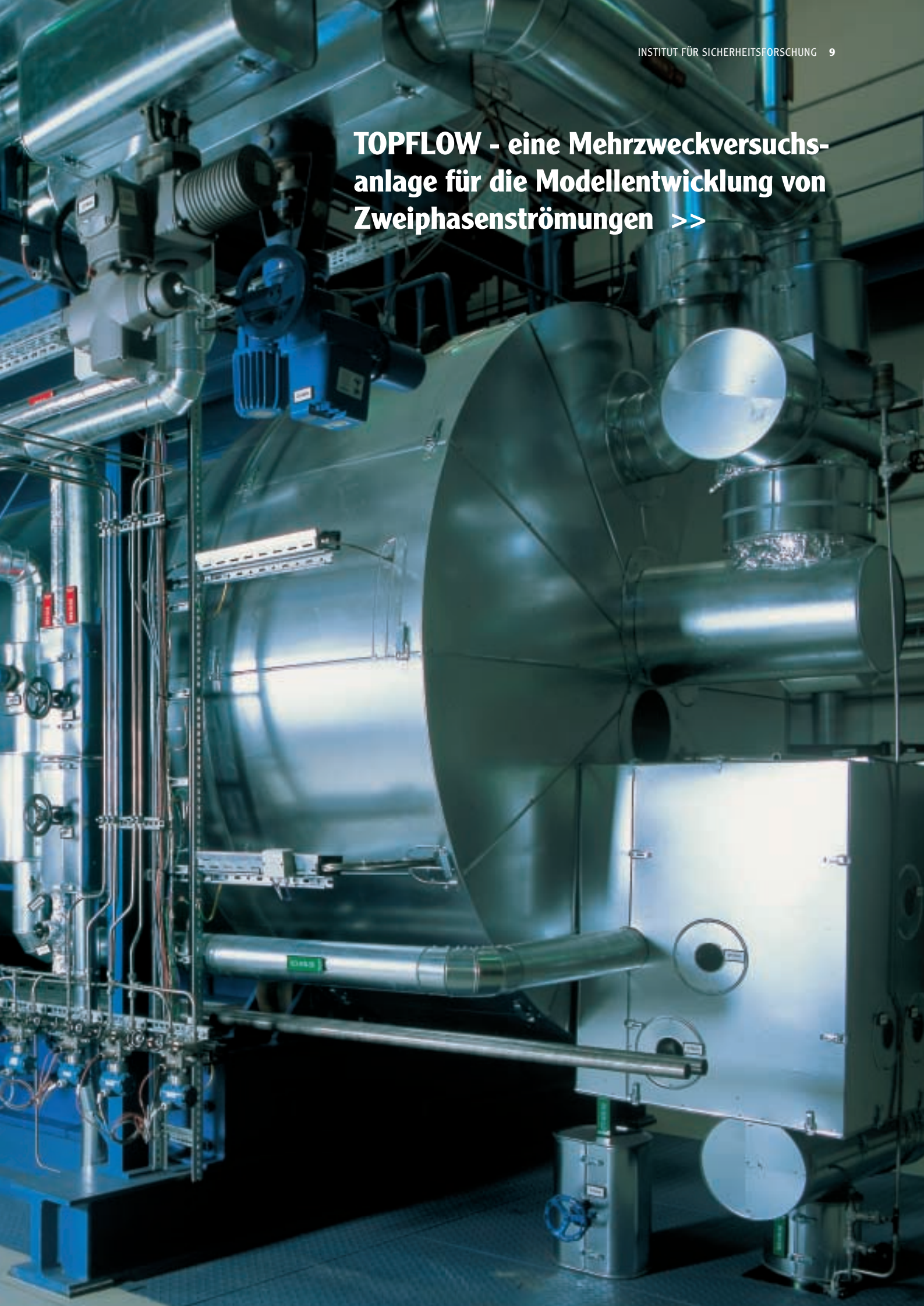
Die Untersuchungen, die mit Wasser-Dampf-Gemischen an der Thermohydraulik-Versuchsanlage TOPFLOW (**T**ransient **T**wo **P**hase **F**low **T**est Facility) durchgeführt werden, eröffnen grundlegende Einblicke in die Natur von Mehrphasenströmungen und dienen auch der Erhöhung der Sicherheit und Effizienz von industriellen Anlagen. Wichtiges Ziel sind hierbei die Entwicklung und Validierung der in Computational Fluid Dynamic (CFD)-Codes erhaltenen Modelle von Zweiphasenströmungen (s. den Beitrag über TOPFLOW, Seiten 10 - 21).

### **Hochfeldlabor Dresden (HLD)**

Das HLD soll gepulste Magnetfelder in bisher unerreichter Feldstärke erzeugen, die Aufschlüsse über Eigenschaften von Festkörpern, Flüssigkeiten, Teilchen und von Halbleitern liefern sollen. Das FZR errichtet das Labor in unmittelbarer Nähe des supraleitenden Elektronenbeschleunigers ELBE; so kann der Infrarotstrahl vom Freien-Elektronen-Laser der Strahlungsquelle ELBE in das Hochfeldlabor geleitet werden, was ab 2007 weltweit einzigartige Hochfeld-Infrarot-Spektroskopie-Experimente ermöglichen wird (zum HLD s. a. Seite 76 im Kapitel Ereignisse).



**TOPFLOW - eine Mehrzweckversuchsanlage für die Modellentwicklung von Zweiphasenströmungen >>**

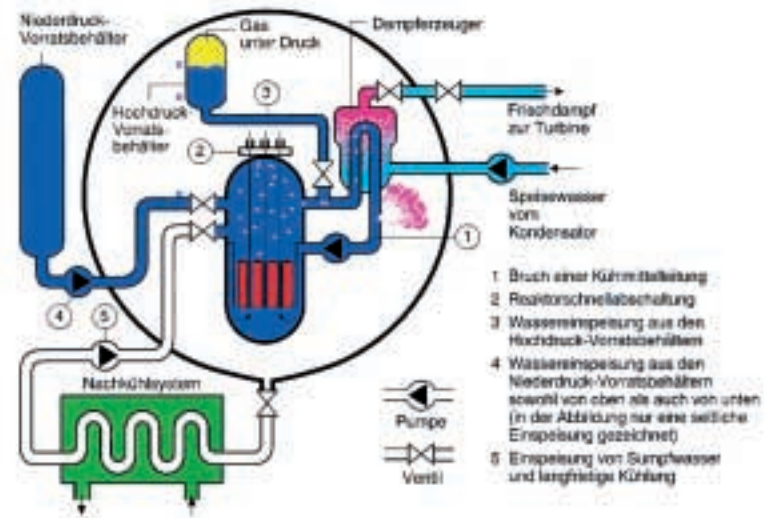


## **TOPFLOW - eine Mehrzweckversuchsanlage für die Modellentwicklung von Zweiphasenströmungen**

Horst-Michael Prasser

Am 19. Oktober 2002 war es soweit: Die neue thermofluiddynamische Versuchsanlage TOPFLOW des Instituts für Sicherheitsforschung erreichte nach einer Bauzeit von 18 Monaten erstmals ihre Auslegungsparameter. Sie ist eines der Großgeräte des Forschungszentrums Rossendorf und in Kombination mit zeitlich und räumlich hochauflösenden Messverfahren für die Untersuchung von Zweiphasenströmungen das experimentelle Kernstück der deutschen Initiative zur Ertüchtigung von dreidimensionalen Strömungsberechnungsprogrammen für den Einsatz auf dem Gebiet der Kernreaktorsicherheit. Ein entsprechendes Forschungsvorhaben, gefördert durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Arbeit im Rahmen des Schwerpunktes Reaktorsicherheitsforschung, mit einem Volumen von ca. 2,9 Millionen Euro und einer Laufzeit von 4 Jahren, ist zum 1.4. 2002 angelaufen. Im Rahmen dieses Projektes liefert TOPFLOW seit Dezember 2002 unikale Messdaten, die direkt in die Entwicklung des dreidimensionalen Strömungsrechenprogramms CFX einfließen. Dieser Computercode wird von der Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit GRS für Aufgaben der Sicherheitsbewertung der in Deutschland betriebenen Kernkraftwerke favorisiert. Das FZR steht hierbei in direktem vertraglichen Kontakt mit dem Entwickler ANSYS-CFX und beteiligt sich an den theoretischen Arbeiten zur Modellentwicklung und zur Implementierung neuer Modelle in das Programm selbst. Damit ist TOPFLOW eine Anlage, die bereits jetzt die Position von Rossendorf in der deutschen Reaktorsicherheitsforschung erheblich gefestigt hat. Im Zuge der Vorbereitung des 6. Rahmenprogramms der EU wird erwartet, dass auch hier TOPFLOW einen wichtigen Beitrag leisten wird und gute Voraussetzungen für die Einwerbung von Projekten schafft. Weiterhin verfolgt das Institut für Sicherheitsforschung das Ziel, die Anlage als OECD Large Scale Facility zu etablieren. Neben der Forschung zu den Grundlagen von Zweiphasenströmungen kann die Anlage auch für angewandte Problemstellungen aus der Industrie genutzt werden, was die Einsatzmöglichkeiten weiter vergrößert.

Abb. 1: Das Kühlmittel in einem Druckwasserreaktor siedet normalerweise nicht, weil es unter hohem Druck gehalten wird. Bei einem Kühlmittelleck sinkt jedoch der Druck und die Verdampfung setzt ein. Notkühlsysteme verhindern, dass der Reaktorkern „trocken läuft“, sonst käme es zur Zerstörung von Brennelementen.



Was ist der forschungsstrategische Ansatz von TOPFLOW und was ist es, was diese Anlage hat und andere nicht?

Um das anschaulich machen zu können, ist ein Exkurs in die Theorie und die Betrachtung der dort anstehenden Aufgaben nötig:

### Anspruchsvolle Strömungsberechnungen für mehr Sicherheit im Kernkraftwerk

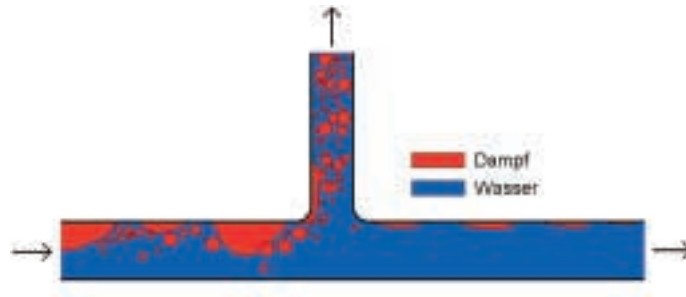
Immer leistungstärkere Computer machen es möglich, zunehmend kompliziertere Strömungsfelder zu berechnen. Die Methode heißt „Computational Fluid Dynamics“ - abgekürzt CFD - und ist heute Stand der Technik, wenn es zum Beispiel um die Senkung des Treibstoffverbrauchs von Verkehrsmitteln geht. Deren Aero- bzw. Hydrodynamik kann mittlerweile durch numerische Simulationen verbessert werden, ohne dabei jede Gestaltungsvariante der Autokarosserie, der Flugzeugtragfläche oder des Schiffsrumpfes in aufwändigen Experimenten testen zu müssen.

Im Fall von reinen Gas- oder reinen Flüssigkeitsströmungen ist die Computersimulation weit fortgeschritten und liefert verlässliche Resultate mit guter Genauigkeit. Dies verdankt man unter anderem dem fortgeschrittenen Stand bei der Turbulenzmodellierung und bei den numerischen Verfahren zur Lösung der bestimmenden Navier-Stokesschen Differentialgleichungen, die durch die ihnen innewohnende Nichtlinearität den Wissenschaftlern und Programmentwicklern eine harte Nuss zu knacken gaben.

Wesentlich weniger treffsicher sind diese Methoden, wenn es um Gemische aus einem Gas und einer Flüssigkeit geht. So etwas ist im Innern von chemischen und kraftwerkstechnischen Anlagen häufig anzutreffen, wenn Flüssigkeiten mit Gasen zur Reaktion gebracht werden müssen, bei Störungen in Chemieanlagen ungewollt Gase aus flüssigen Reaktionsansätzen freigesetzt werden oder wenn es schlicht um die Produktion von Dampf für den Betrieb einer Kraftwerksturbine geht. In der Kerntechnik ist es die unter allen Umständen aufrechtzuerhaltende sichere Kühlung der Brennstäbe, bei der solche Zweiphasenströmungen eine Rolle spielen.

Nehmen wir zum Beispiel einen Druckwasserreaktor (Abb. 1): In ihm steht das als Kühlmittel und Moderator fungierende Wasser unter einem so hohen Druck, dass es auch bei Temperaturen von über 300 °C noch nicht verdampft. Dieses Wasser dient zum Transport der bei der Kernspaltung entstehenden Energie aus dem Reaktor zu den Dampferzeugern, wo es die Wärme an das Wasser im Sekundärkreislauf abgibt. Es steht unter einem geringeren Druck und verdampft dabei. Dieser Dampf treibt letztlich die Turbine an. Im Kühlkreislauf des Reaktors selbst bleibt das Wasser „einphasig“. Fragestellungen wie die Ermittlung der bei Normalbetrieb vorliegenden Geschwindigkeitsverteilung im Reaktorkern, wo sich die Brennstäbe befinden, unterscheiden sich daher mathematisch kaum

**Abb. 2:** Die Anteile von Wasser und Dampf werden unterschiedlich aufgeteilt, wenn eine Zweiphasenströmung eine Rohrabzweigung durchläuft. Dieser sehr komplizierte Effekt kann derzeit nur durch empirische Modelle beschrieben werden - CFD-Codes liefern noch keine befriedigenden Ergebnisse.



von der Berechnung der Umströmung eines Schiffsrumpfes. So etwas kann heute schon mit gutem Erfolg mit kommerziell angebotenen CFD-Programmen berechnet werden.

Anders sieht es bei einer Störung aus, z.B. bei einem Leck im Primärkreislauf. Hierbei fällt der Druck ab, das heiße Kühlmittel beginnt zu verdampfen und in weiten Teilen der Reaktoranlage tritt eine Zweiphasenströmung auf. Jetzt müssen die Notkühlsysteme es verhindern, dass der Reaktor „trockenläuft“. In den heute betriebenen Reaktoren treten mehrere redundante Systeme dieser Art nacheinander in Aktion, die dazugehörigen Pumpen können vom Netz unabhängig durch Dieselgeneratoren mit Strom versorgt werden, die ebenfalls mehrfach vorhanden sind.

Will man berechnen, wie sich Wasser und Dampf bei solchen komplexen Vorgängen im Reaktor und den Komponenten des Primärkreislaufs verteilen, um zu ermitteln, ob die jeweilige Störung von den Sicherheitssystemen ohne unzulässige Überhitzung der Brennelemente beherrscht werden kann, so wird man feststellen, dass die heute verfügbaren CFD-Codes - so heißen die Strömungsrechenprogramme im Expertenslang - mit der Zweiphasenströmung nicht zu Rande kommen. Die Rechenfehler sind bei weitem zu hoch, um die Codes zur Bewertung der Sicherheit von Kernkraftwerken einsetzen zu können.

Bisher wurden deshalb sogenannte Thermohydraulik-Rechenprogramme verwendet, die die Verteilung von Wasser und Dampf und letztlich die Kühlung des Reaktorkerns ohne die aufwändige Berechnung dreidimensionaler Geschwindigkeitsfelder ermitteln. Ihnen liegt ein mathematisches Modell zugrunde, bei dem der Strömungsweg im Reaktorkreislauf in einzelne Abschnitte unterteilt wird, in denen die Massen-, Impuls- und Energiebilanzen für die beiden strömenden Phasen - Wasser und Dampf - in eindimensionaler Näherung beschrieben werden. Jeder dieser Abschnitte, Nodes (Rechenknoten) genannt, ist einem Stück Rohrleitung ähnlich, in das das Kühlmittel auf der einen Seite eintritt und aus dem es auf der anderen wieder hinausströmt, wobei im Node selbst Wärme und Impuls zugeführt oder abgeführt werden kann. So wird beispielsweise in einem Node zur Nachbildung eines Brennelements die dort freigesetzte Wärmeleistung und daraus die Aufheizung und ggf. die Verdampfung des Kühlmittels modelliert. Eine Pumpe kann rechnerisch nachgebildet werden, indem dem Kühlmittel im entsprechenden Node der durch die Pumpe eingebrachte mechanische Impuls zugeführt wird. Diese Nodes werden untereinander numerisch gekoppelt, so dass das Verhalten des Gesamtsystems berechnet werden kann.

Leider kann diese Näherung, die sogenannte eindimensionale Strömungssimulation, die Strömungsverhältnisse in komplexen Situationen, wo räumlich große Ungleichmäßigkeiten in den Strömungsfeldern vorherrschen, nicht beschreiben. Als Beispiel sei die Strömung in einer Rohrleitungsabzweigung (Abb. 2) genannt, wo die Aufteilung von Wasser und Dampf in beide Schenkel bisher nur durch aufwändige Experimente an großen

Versuchsständen ermittelt werden konnte. Die Ergebnisse der Messungen wurden dann aufbereitet und in Form von empirischen Gleichungen in die Thermohydraulik-Codes eingebaut. Mit dieser Kombination aus grundlegenden physikalischen Erhaltungssätzen und experimentell ermittelten empirischen Beziehungen wurde eine Berechnungsgenauigkeit erreicht, die es erlaubte, die heute existierenden Reaktoren auszulegen und ihre Sicherheit nachzuweisen.

Der Ruf nach immer genaueren und von empirischen Ansätzen unabhängigeren Berechnungsverfahren führt jedoch zum Bestreben, zukünftig die thermohydraulischen Rechenprogramme durch CFD-Codes zu ersetzen, denn im Grunde müsste es möglich sein, die dreidimensionalen Strömungsfelder an den Stellen, wo man bisher ohne Empirie nicht auskam, ausgehend von den Grundgleichungen der Strömungsmechanik auf dem Computer zu berechnen. Man erhofft sich auf diese Weise, flexiblere Rechenmodelle von Kernreaktoranlagen zu bekommen, mit denen Veränderungen der Anlage oder der Betriebsparameter berücksichtigt werden können, ohne dabei erneut einen hohen experimentellen Aufwand treiben zu müssen. So etwas kann z.B. bei sicherheitstechnischen Nachrüstungen oder Leistungserhöhungen notwendig sein. Außerdem verspricht man sich eine weitere Erhöhung der Rechengenauigkeit.

### **Entwicklung von CFD-Codes benötigt neue Qualität von Experimenten**

Warum aber scheitern die CFD-Codes bislang an der Zweiphasenströmung? Es liegt an der Komplexität der Wechselwirkung der beiden, gemeinsam strömenden Phasen Wasser und Dampf. Dadurch dass sie nicht mischbar sind, werden sie stets von einer so genannten Phasengrenze getrennt. Bei niedrigen Dampfgehalten liegt der Dampf meist in Form von Bläschen vor, die in der Flüssigkeit verteilt sind. Bei höheren Dampfgehalten ist es umgekehrt: das Wasser bildet Tröpfchen, die vom Dampf mitgerissen werden. Dazwischen sind je nach den vorherrschenden Geschwindigkeiten die exotischsten Formen der Phasengrenzfläche zu beobachten. Es kann sich aber auch einfach eine Schichtung mit einer mehr oder weniger bewegten Wasseroberfläche herausbilden, wenn das Gemisch nur langsam strömt.

Über diese Phasengrenzfläche erfolgt nun ein ständiger Austausch von Masse, mechanischem Impuls und Energie zwischen den beiden Phasen. Hier liegt eine wesentliche Schwierigkeit: Dieser Austausch muss mathematisch beschrieben werden, wenn CFD-Codes Geschwindigkeitsfelder und Dampfgehaltsverteilungen richtig berechnen sollen - und das bei der Kompliziertheit und Vielfalt, die die Gestalt der Phasengrenzfläche und ihre dynamische Veränderung aufweist. Erneut muss man auf Empirie zurückgreifen: Die Gleichungen, die man zur Beschreibung der Wechselwirkungen von Dampf und Wasser an der Phasengrenze benötigt, müssen anhand von Experimenten ermittelt werden. Doch diese Empirie hat eine neue Qualität, denn sie ist von den geometrischen

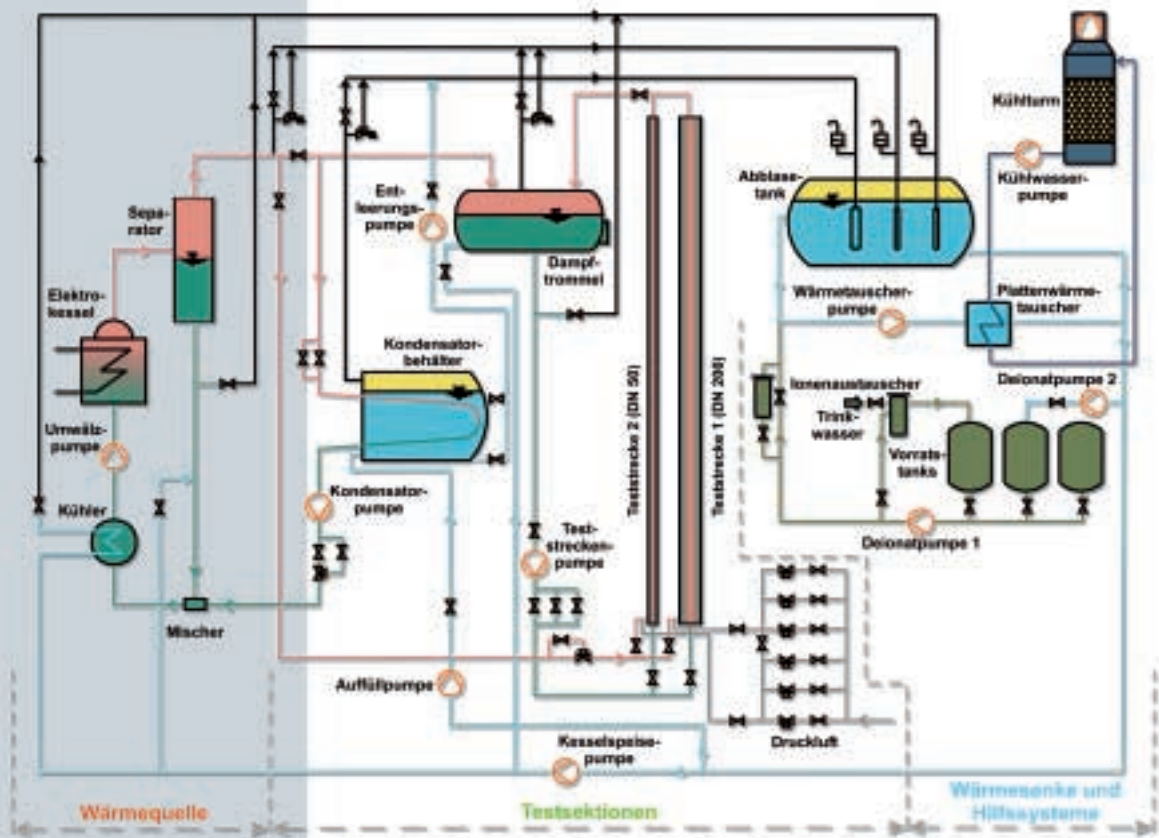


Abb. 3: Prinzipielles Schema der Mehrzweck-Versuchsanlage TOPFLOW

### Eine neue Versuchsanlage mit innovativer Messtechnik

Randbedingungen, d.h. von der Gestalt des Strömungsgebiets unabhängig. In den ein-dimensionalen Thermodynamikmodellen musste noch das Verhalten eines ganzen Strömungsgebiets durch ein einziges Node repräsentiert werden. Für die CFD-Codes sind hingegen nur noch Modelle aufzustellen, die die Ausdehnung und Veränderung der Phasengrenzfläche sowie der Intensität des Massen-, Impuls- und Energieaustauschs zwischen den Phasen lokal beschreiben. Die Eingangsgrößen für diese lokalen Modelle sind z.B. die Geschwindigkeiten der Gas- und der Flüssigphase, die sich durch die Lösung der dreidimensionalen Erhaltungsgleichungen im CFD-Code von selbst ergeben. Die Gestalt des Strömungsgebiets wird hierbei durch die Vorgabe der geometrischen Randbedingungen in Form des dreidimensionalen Rechengitters berücksichtigt.

An dieser Stelle kommt die Versuchsanlage TOPFLOW ins Spiel. Ihre Aufgabe ist es, experimentelle Daten zu liefern, die für die Ermittlung der erforderlichen empirischen Beziehungen zur Beschreibung der Gestalt, Ausdehnung und Dynamik der Phasengrenzfläche und der Wechselwirkungen zwischen den Phasen Wasser und Dampf unter unterschiedlichsten Strömungsbedingungen erforderlich sind.

TOPFLOW ist dementsprechend zunächst einmal eine Anlage zur Bereitstellung von Dampf und Wasser bei reaktortypischen Drücken und Temperaturen (Abb. 3). Die Parameter von TOPFLOW sind im Vergleich zu anderen Versuchsanlagen durchaus beachtlich: Mit einer maximalen Heizleistung von 4 MW - damit kann man eine Kleinstadt mit Strom versorgen - können mit einem Elektro-kessel (Abb. 4) bis zu ca. 2 kg/s Dampf bei einem Druck von maximal 70 bar und einer Temperatur von bis zu 285 °C erzeugt werden. Ein wichtiges Element ist hierbei die möglichst genaue Messung der für



**Abb. 4:** Im Elektrokessel von TOPFLOW durchläuft das Wasser ein Bündel von Stahlrohren, durch die ein starker elektrischer Strom geschickt wird. Die Rohre erwärmen sich und das Wasser verdampft. So werden bei 4 MW Heizleistung ca. 2 kg Dampf je Sekunde erzeugt.



Experimente bereitgestellten Mengen. Mit Hilfe mehrerer gestaffelter Durchflussmessstellen kann der Dampfmassenstrom über einen Bereich von über 5 Größenordnungen mit einer Genauigkeit besser als 1,5 % eingestellt und gemessen werden. Ähnlich gute Werte werden von den Messstrecken für den Wasserdurchsatz und die bei einigen Versuchen verwendete Pressluft erreicht. Diese hohen Genauigkeiten sind zur Einstellung definierter Randbedingungen in den angeschlossenen Teststrecken erforderlich.

Ein weiterer wichtiger Bestandteil von TOPFLOW ist die Wärmesenke, mit der der Dampf nach Durchlaufen der jeweiligen Versuchsaufbauten wieder kondensiert werden kann. Hierzu dient ein Abblasetank, der an einen Kühlkreislauf angeschlossen ist. Die Wärme wird zu einer Einheit aus Trockenkühltürmen geleitet, die sich auf dem Dach des TOPFLOW-Gebäudes befinden (Abb. 5). Zwischen Wärmequelle (Elektrokessel) und Wärmesenke (Abblasetank mit Kühlturmsystem) sind die eigentlichen Teststrecken geschaltet. Dies sind zum einen zwei vertikale Teststrecken mit Innendurchmessern von 50 bzw. 200 mm, der Kondensatorbehälter mit einem Wärmeübertragerbündel aus 8 Rohren (ein großer liegender Behälter mit einem Volumen von ca. 18 m<sup>3</sup>) und die Dampftrommel mit einem Volumen von ca. 8 m<sup>3</sup>. Im derzeit laufenden Forschungsvorhaben geht es zunächst um die Zweiphasenströmung in senkrechten Rohrleitungen. Hierfür sind zwei 9 m hohe Teststrecken mit den Nennweiten von 50 bzw. 200 mm vorgesehen.



**Abb. 5:** Auf dem Dach des Werkstatttrakts von TOPFLOW ist eine Kühlturmanlage installiert, die die bei der Kondensation des Abdampfs aus den Versuchsanlagen anfallende Wärme abführt.

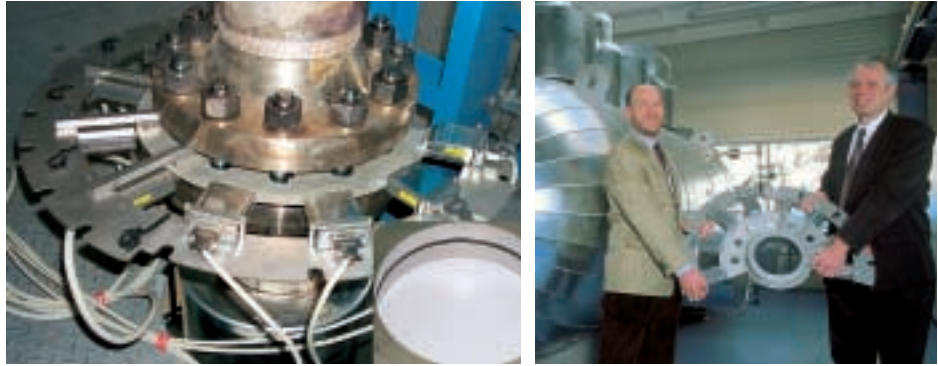
Man wird sich fragen, wieso gerade einfache senkrechte Rohrleitungen als Untersuchungsobjekt ausgewählt wurden, wenn es doch eigentlich um die Entwicklung von Modellen für CFD-Codes geht, die komplizierte Anlagen simulieren sollen. Die Antwort liegt in der Art der Modellierung: Wie bereits dargelegt, geht es darum, das Verhalten der Phasengrenzfläche (also beispielsweise der Dampfblasen, wenn eine Blasenströmung vorliegt) unter definierten Bedingungen über eine möglichst lange Zeit beobachten zu können. Das geht im Schwerfeld der Erde nur in einem möglichst langen, vertikalen Strömungskanal, in dem man in der wandnahen Grenzschicht und im ungestörten Kernbereich der Strömung annähernd konstante Verhältnisse vorfindet. In allen anderen Geometrien kommt es rasch zu einer mehr oder weniger starken Phasentrennung. Erst nach Integration der an den vertikalen Leitungen entwickelten Modelle in den CFD-Code wird zu komplexeren Geometrien übergegangen. Hierzu werden Störungen in Form von Blenden in die Rohrleitung eingebaut und die Phasenverteilungen davor und danach ermittelt. Mit diesen Daten wird dann überprüft, inwieweit der ertüchtigte CFD-Code eine Übertragung auf komplexere Strömungssituationen zulässt.

Weltweit existieren eine Reihe von Versuchsanlagen mit vertikalen Rohrleitungen als Kernstück. Dabei ist die Tendenz zu verzeichnen, den Rohrleitungsdurchmesser zu vergrößern, um im Maßstab näher an die Größenordnung von realen Anlagen heranzukommen. Dabei wurde beobachtet, dass z.T. erhebliche Skalierungseffekte vorliegen. Die Evolution der Phasengrenzfläche wird in Rohrleitungen kleineren Durchmessers noch sehr stark von der Nähe der Rohrwandungen bestimmt. Erst ab einem bestimmten kritischen Durchmesser, der je nach Druck für ein Wasser-Dampf-Gemisch zwischen 80 und 150 mm liegt, kann die Phasengrenzfläche in ihrer freien Entfaltung untersucht werden. Deshalb wurden für TOPFLOW die beiden Nennweiten 50 und 200 mm gewählt: Die beiden Durchmesser liegen jeweils unterhalb bzw. oberhalb des kritischen Werts, was die Beobachtung der Skalierungseffekte möglich macht. Die Stärke von TOPFLOW, verglichen mit anderen Anlagen, liegt hierbei in der Kombination von

- > großem Rohrleitungsdurchmesser,
- > weitem Parameterbereich, sowohl hinsichtlich der thermodynamischen Parameter (Druck, Temperatur) als auch der Massenströme von Dampf und Wasser,
- > sowie zeitlich und räumlich hochauflösender Messtechnik.

Weltweit waren Versuchsanlagen bisher entweder nur für Untersuchungen mit einem Wasser-Luft-Gemisch bei nahezu Atmosphärendruck ausgelegt, um optische oder elektrische Mehrpunktsonden zur Charakterisierung der Phasengrenzfläche einsetzen zu können, oder es handelte sich um Hochdruckanlagen, aber ohne eine ausreichend feine Instrumentierung. Häufig kamen außerdem Beschränkungen der erreichbaren Massenströme hinzu und es handelte sich um kleinere Rohrleitungsdurchmesser.

**Abb. 6:** Der größte bisher gebaute Gittersensor für eine Zweiphasenströmung verfügt über zwei Gitter von je 64 dünnen Elektrodrähten und erreicht damit eine Auflösung von 3 mm in einem Messquerschnitt von 194,1 mm Innendurchmesser. Die Messfrequenz beträgt 2500 Bilder pro Sekunde. Der Sensor entstand in Zusammenarbeit mit TELETRONIC GmbH.



Bei der Instrumentierung der Teststrecken von TOPFLOW kommen Gittersensoren zum Einsatz, die vom Institut selbst in Kooperation mit der TELETRONIC GmbH, einem in Rossendorf ansässigen mittelständischen Unternehmen, entwickelt wurden (Abb. 6). Sie arbeiten nach dem Prinzip der elektrischen Leitfähigkeitsmessung mit Hilfe von zwei hintereinander angeordneten Gittern aus Elektrodrähten. Mit ihnen wird eine bisher unerreichte Charakterisierung der Phasengrenzfläche möglich: Der Sensor liefert Phasenverteilungen aus dem gesamten Strömungsquerschnitt mit einer Auflösung von wenigen Millimetern und einer Frequenz von mehreren tausend Bildern pro Sekunde. Selbst kleinere Blasen werden so während ihrer Passage durch die Messebene in mehreren aufeinander folgenden Verteilungen abgebildet, wodurch die Daten neben einer Zeitlupenvisualisierung der Strömungsstruktur die Ermittlung von Blasengrößenverteilungen ermöglichen. Zum Vergleich: Während man mit einer üblichen lokalen Sonde für die Messung eines Profils entlang des Rohrdurchmessers Stunden benötigte, können vollständige zweidimensionale Verteilungen aus dem gesamten Messquerschnitt mit Hilfe des Gittersensors in wenigen Sekunden mit ausreichender statistischer Sicherheit ermittelt werden. Die neue Qualität der Instrumentierung erlaubt wesentlich umfangreichere Parameterstudien als bisher und führt damit zu einer drastischen Verbesserung der Möglichkeiten für die Modellbildung.

Neben den vertikalen Testsektionen sind im Rahmen des laufenden TOPFLOW-Projekts Experimente zum Verhalten im Heißstrang eines Kernkraftwerks mit Druckwasserreaktor vorgesehen. Beim Heißstrang handelt es sich um den Teil des Primärkreislaufs, der den Kühlmittelaustritt aus dem Reaktor mit dem Dampferzeuger verbindet. Bei Verlust von Kühlmittel kann der Füllstand im Reaktor unter das Niveau des Kühlmittelaustrittsstützens abfallen, so dass der Wasserumlauf unterbrochen wird. Die Wärmeabfuhr aus dem Reaktorkern erfolgt unter diesen Bedingungen durch Verdampfung von Kühlmittel. Der Dampf gelangt über den Heißstrang in den Dampferzeuger, wo er durch Abgabe von Wärme an das Sekundärmedium wieder kondensiert. Das sich bildende Kondensat läuft im Gegenstrom über die Heißstrangleitung in den Reaktor zurück. Diese Betriebsform des Heißstrangs wird „Reflux Condenser Mode“ genannt. Damit der Reaktorkern weiterhin mit ausreichend Wasser versorgt wird, darf es nicht zur so genannten Gegenstrombegrenzung kommen, die auftritt, wenn der Dampfstrom zu stark wird und damit das Kondensat am Zurückfließen hindert.

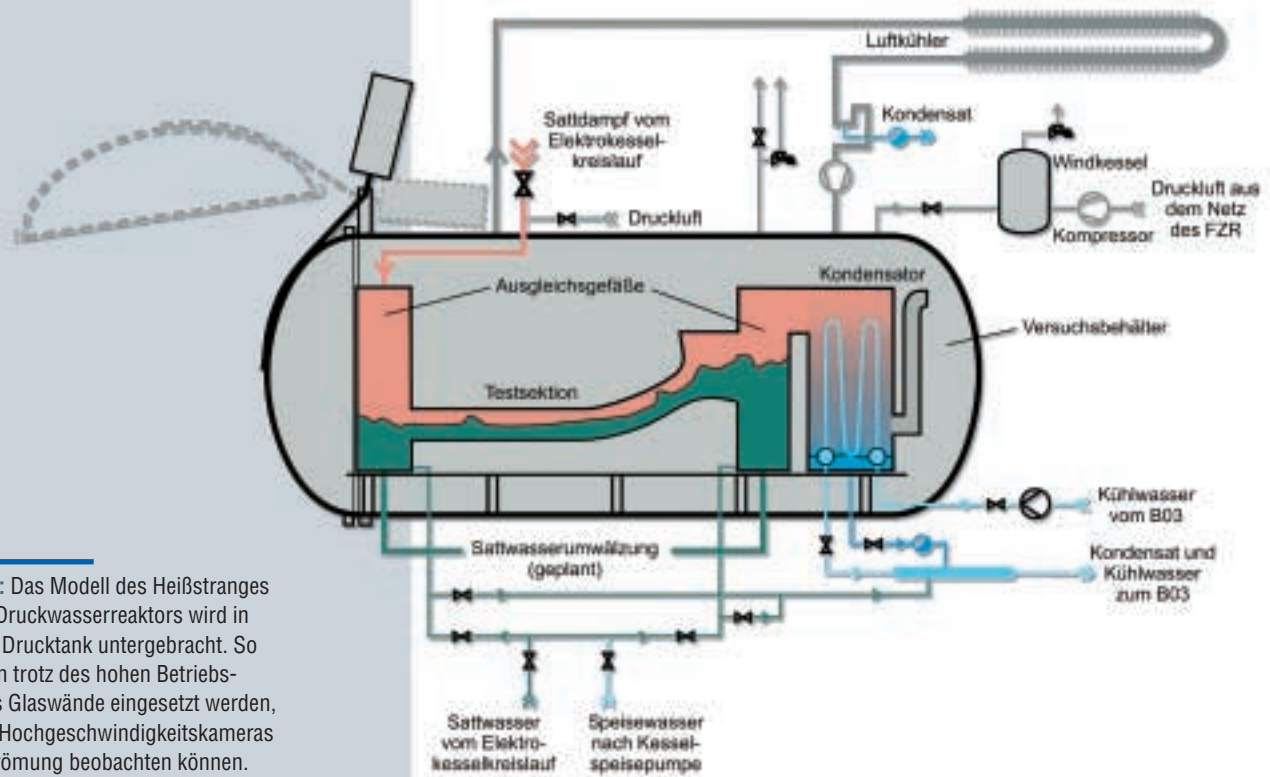


Abb. 7: Das Modell des Heißstranges eines Druckwasserreaktors wird in einem Drucktank untergebracht. So können trotz des hohen Betriebsdrucks Glaswände eingesetzt werden, damit Hochgeschwindigkeitskameras die Strömung beobachten können.

Bisher gibt es zur Berechnung des Dampfmassenstroms, bei dem Gegenstrombegrenzung einsetzt, nur empirische Korrelationen. Die bedeutendsten Experimente hierzu sind an der mittlerweile abgerissenen Großversuchsanlage UPTF in Mannheim ermittelt worden. Im Rahmen der Ertüchtigung von CFD-Codes für Reaktorsicherheitsuntersuchungen soll nunmehr der Effekt der Gegenstrombegrenzung durch dreidimensionale Simulation ausgehend von den fluiddynamischen Grundgleichungen modelliert werden, um auch hier die Geometrieabhängigkeit der empirischen Modelle zu überwinden.

Die Versuche zu diesem Thema sollen in einem im Maßstab 1:3 verkleinerten Modell des Heißstrangs durchgeführt werden. Eine neue Qualität der Instrumentierung wird durch den Einsatz von Hochgeschwindigkeitskameras erreicht, welche die Phasenverteilung im Heißstrang im Eintrittsbereich des Dampferzeugers möglichst großräumig beobachten können. Dafür muss die Teststrecke mit Glaswänden ausgestattet werden. Doch gleichzeitig sollen die Versuche in einem kraftwerkstypischen Druckbereich bis ca. 50 bar durchgeführt werden. Wie sollen Glasscheiben diesem Druck standhalten? Die Lösung: Die gesamte Teststrecke wird in einem Drucktank untergebracht, in dem mit Hilfe eines Kompressors ein Gegendruck aufgebaut wird, der dem Druck innerhalb des Heißstrangmodells entspricht (Abb. 7). Auf diese Weise kompensieren sich die Kräfte, die von innen und außen auf die Glaswände wirken. Damit der Druckausgleich stets optimal funktioniert, wird der Abdampf aus dem Heißstrangmodell in einem speziell dimensionierten Kondensator niedergeschlagen, der sich ebenfalls im Drucktank befindet. Zwischen dem kalten Ende dieses Wärmeübertragers und der Innenluft des Drucktanks besteht eine Verbindung, die den Druckausgleich gewährleistet. Außerdem wird die Innenluft über einen zusätzlichen Wärmeübertrager auf einer ausreichend niedrigen Temperatur gehalten, um elektronische Geräte wie Kameras, Vorverstärker für Sensoren o.ä. direkt im Tank anzuordnen. Die Planungsarbeiten zu diesem Versuchsstand sind mittlerweile in vollem Gange. Ein weiteres Experiment von TOPFLOW ist in dem so genannten Kondensatorbehälter (Abb. 8) untergebracht. Es handelt sich um ein Wärmeübertragerbündel, das ein Modell

**Abb. 8:** Im Kondensatorbehälter von TOPFLOW befindet sich ein originalgetreues Modell des Notkondensators eines neuentwickelten Reaktortyps.



eines Notkondensators für einen innovativen Siedewasserreaktor darstellt. An dieser Komponente von TOPFLOW können detaillierte Untersuchungen zu diesem passiv arbeitenden Notkühlsystem vorgenommen werden. Passiv bedeutet, dass die Wärmeabfuhr aus dem Reaktorkern gänzlich ohne Schalthandlungen (Öffnen von Ventilen, Zuschalten von Pumpen o.ä.) startet und ohne Fremdenergie einzig durch Naturumlaufvorgänge in Gang gehalten wird. Für Kondensationsexperimente an dieser Testeinrichtung wurde ebenfalls ein neuartiger Zweiphasensensor entwickelt, der zukünftig zum Einsatz kommen kann. Es handelt sich um eine lokale, elektrische Gasgehaltssonde, bei der die Messelektrode gleichzeitig ein Mikrothermoelement darstellt. Damit ist es möglich, Temperaturprofile im Kondensationsfilm bei gleichzeitiger Ermittlung der Filmdicke zu messen sowie die Anreicherung von nichtkondensierbaren Gasen im Dampf nachzuweisen.

Die Möglichkeiten von TOPFLOW als Mehrzweckversuchsanlage sind hierdurch noch lange nicht erschöpft. So stellt die vertikale Teststrecke der Nennweite 200 mm ein 9 m hohes Druckgefäß mit durchaus nennenswertem Volumen dar, das für Druckentlastungsversuche Verwendung finden könnte. In Kombination mit der kleinen Teststrecke sind auch Naturumlaufexperimente denkbar, wie sie für die Untersuchung von Siedewasserreaktoren von Bedeutung sein können. Vielseitig nutzbar wird der Drucktank sein, in dem außer dem Heißstrangmodell noch andere Experimente unter hohem Druck mit sehr kostengünstigen Versuchsaufbauten realisiert werden können, denn durch die Methode des Druckausgleichs brauchen die Komponenten derartiger Versuche nicht druckfest ausgelegt zu werden. Die Einsatzmöglichkeiten für unterschiedliche Messverfahren verbessern sich dadurch ebenfalls erheblich. So wird derzeit daran gedacht, einen Versuch zur Wechselwirkung von kaltem Notkühlwasser mit der Reaktordruckbehälterwand im Drucktank aufzubauen. Die dabei ablaufenden Thermoschockbelastungen werden als PTS (Pre-stressed Thermal Shock) bezeichnet und sind Gegenstand des geplanten Forschungsprojekts NURESIM im 6. Rahmenprogramm der EU.

Abb. 9: Eine Möglichkeit der Darstellung der Messergebnisse des Gittersensors sind virtuelle Seitenansichten, die am Computer erstellt werden. Hier ist der Übergang von einer Blasenströmung bei niedrigem Luftgehalt zu einer so genannten turbulent-aufgewühlten Strömung zu sehen. Eine Stärke von TOPFLOW besteht in der Möglichkeit, Flüssigkeits- und Gasdurchsätze in weiten Bereichen variieren zu können.

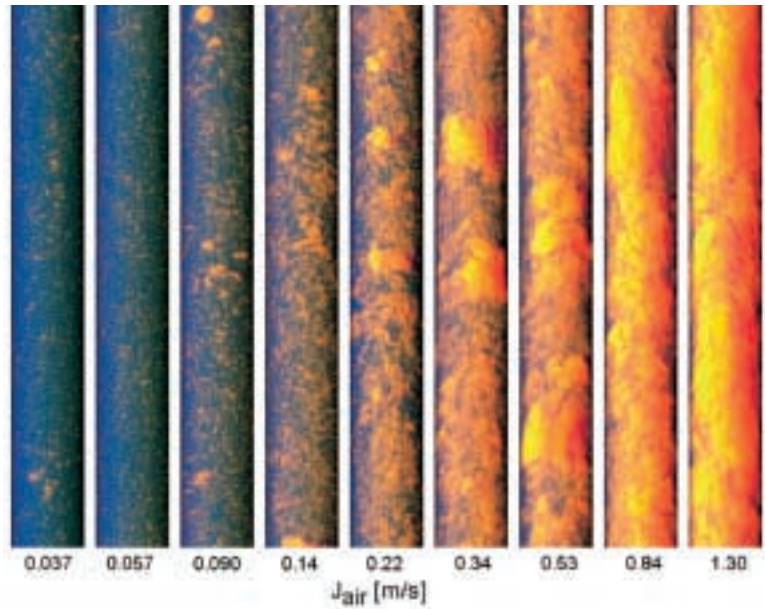


Abb. 10: Bei höheren Luftdurchsätzen bilden sich zunehmend Großblasen, die zur Herausbildung eines zweiten Maximums in der Blasengrößenverteilung führen. Dabei verhalten sich kleine und große Rohrleitungen deutlich unterschiedlich. Experimente an TOPFLOW klären die Ursachen für diese Effekte auf.

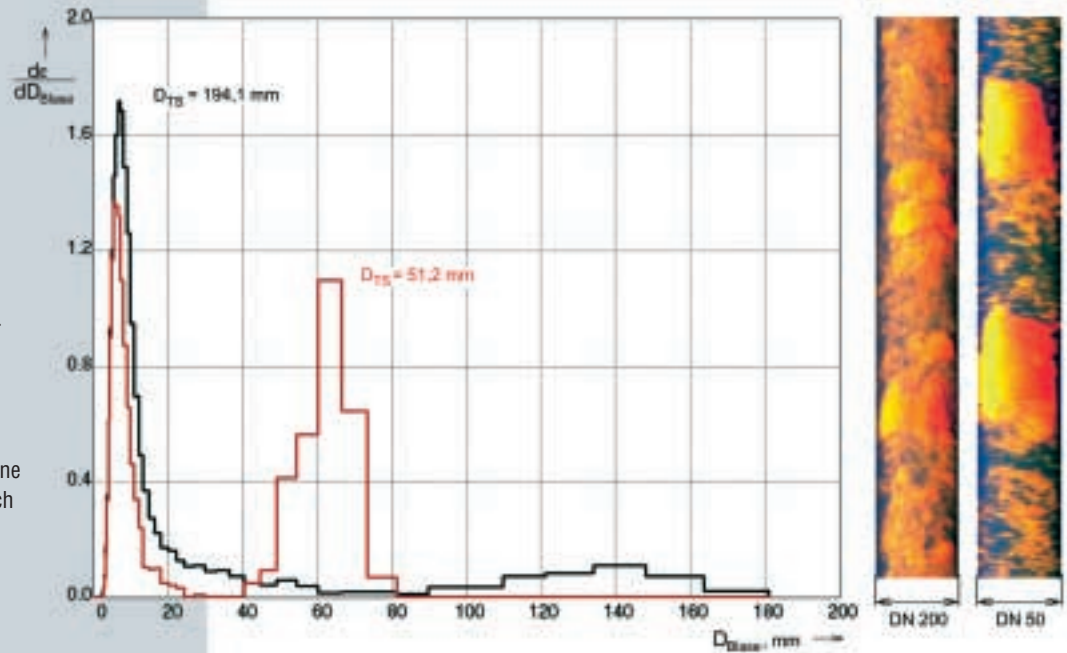
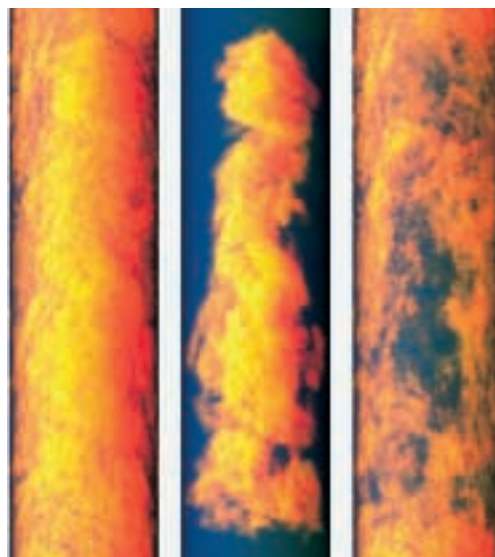


Abb. 11: Mit dem Computer kann eine einzelne Großblase, die sich in einer turbulent-aufgewühlten Strömung hinter einem Schwarm kleinerer Blasen verbirgt, sichtbar gemacht werden. Erstmals wurde die komplexe Gestalt einer solchen Blase erkennbar.



## Erste Ergebnisse

Die ersten Ergebnisse lieferten Vorversuche, bei denen die vertikalen Teststrecken zunächst mit einem Wasser-Luft-Gemisch betrieben wurden. Hierbei kam erstmalig ein Gittersensor mit einer Matrix von 64 x 64 Messpunkten zum Einsatz, der bei einer Messfrequenz von 2500 Bildern pro Sekunde eine räumliche Auflösung von 3 mm liefert. Bei den Messungen werden die eingespeiste Luftmenge und der Wasserdurchsatz variiert und dabei verschiedene Strömungsregimes durchlaufen. Durch eine spezielle Technik der Datenverarbeitung wurden die Messdaten des Gittersensors in eine virtuelle Projektionsdarstellung umgeformt. Dadurch entsteht der Eindruck einer Seitenansicht der Strömung. In Abb. 9 sind die Ergebnisse der auf diese Weise erhaltenen Visualisierung der Messdaten dargestellt, wobei die Volumenstromdichte der Luft bei konstantem Wasserdurchfluss stufenweise erhöht wurde. Zu erkennen ist, wie die anfänglich vorliegende Blasenströmung immer mehr in eine so genannte turbulent-aufgewühlte Strömung übergeht. Dabei zeigt sich in der Blasengrößenverteilung ein zweites Maximum bei sehr großen Blasendurchmessern. Dieses Verhalten wird in ähnlicher Weise auch in der kleinen Teststrecke mit der Nennweite 50 mm vorgefunden. Dort findet jedoch bei identischen Volumenstromdichten zunächst ein Übergang zu einer Pfropfenströmung statt. Die Blasengrößenverteilung zeigt deshalb eine ausgeprägte Abhängigkeit vom Rohrleitungsdurchmesser (Abb. 10).

Erstmals konnte bei diesen Experimenten die Form von Großblasen unter den Bedingungen der turbulent-aufgewühlten Strömung charakterisiert werden. Die Daten des Gittersensors werden hierzu mit Hilfe eines Computers nach zusammenhängenden, mit der Gasphase gefüllten Gebieten durchsucht. Werden die lokalen Momentanwerte des Gasgehalts in allen nicht zu einem solchen Gebiet gehörenden Matrixpunkten des Gittersensors null gesetzt, dann tritt eine einzelne ausgewählte Gasblase aus dem komplizierten Zweiphasengemisch hervor. Die so modifizierten Daten können anschließend wieder in eine virtuelle Seitenansicht umgeformt werden. Auf diese Weise erhält man ein räumlich wirkendes Abbild dieser Blase. Das Beispiel zeigt das Ergebnis dieser Vorgehensweise für eine Volumenstromdichte der Luft von 1,3 m/s (Abb. 11). Links im Bild ist zunächst die virtuelle Seitenansicht des unverarbeiteten Messsignals des Gittersensors gezeigt. In der Mitte ist eine selektierte Großblase zu sehen, die eine imposante Höhenausdehnung von ca. 660 mm aufweist. Beeindruckend ist die komplizierte Gestalt der Blase, die sich sehr von klassischen Taylor-Blasen unterscheidet, welche in einer Rohrleitung kleineren Durchmessers typischerweise angetroffen werden. Rechts ist schließlich noch das Residuum dargestellt, d.h. eine virtuelle Seitenansicht, konstruiert aus dem Sensorsignal nach Löschen der Gasanteile, die zu der ausgewählten Großblase gehören.

Bereits die hier kurz dargestellten Ergebnisse finden weltweit große Beachtung, wie aus der Resonanz auf der größten internationalen Thermohydraulik-Tagung NURETH-10 abzulesen ist, auf der kürzlich über die Messungen mit dem Luft-Wasser-Gemisch berichtet wurde. Die nächsten Schritte bestehen im Übergang zur Dampf-Wasser-Strömung. Die notwendigen druck- und temperaturfesten Gittersensoren befinden sich inzwischen in der Fertigung. Die Anlage selbst ist seit der am 23.09.2003 erfolgten TÜV-Abnahme für Wasser-Dampfversuche bereit.

Zum TOPFLOW-Team gehören Matthias Beyer, Klaus Lindner, Heiko Pietruske, Heiko Rußig, Peter Schütz, Marko Tamme und Steffen Weichelt unter der Leitung von Herrn Dr. Helmar Carl.

## **Atomkerne im Photonenstrahl >>**

**Erste kernphysikalische Experimente mit  
Bremsstrahlung am Beschleuniger ELBE**





## Erste kernphysikalische Experimente mit Bremsstrahlung am Beschleuniger ELBE

### Atomkerne im Photonenstrahl

Ronald Schwengner

Atomkerne, die winzig kleinen Bausteine der Materie, sind für Physiker interessante Gebilde. Sie bestehen aus Protonen und Neutronen, deren Anzahl zwischen eins (Wasserstoff) bis etwa zweihundertundachtzig (Transurane) variieren kann. Atomkerne sind damit Vielteilchensysteme, die die unterschiedlichsten Bewegungsformen ausführen können. So können sie wie Wassertröpfchen als Ganzes schwingen oder rotieren, die Protonen und Neutronen können aber auch einzeln besondere quantenmechanische Bahnen durchlaufen. Das Verständnis solcher mikroskopischer Vielteilchensysteme ist für viele Gebiete der modernen Physik und deren Anwendungen sehr wichtig. So spielen endliche Vielteilchensysteme wie Fullerene oder Nanotubes in der Festkörperphysik eine große Rolle bei der Entwicklung neuartiger Werkstoffe und Verfahren.

Die Besonderheiten der winzigen Atomkerne sind erstaunlicherweise auch für Vorgänge in ganz riesigen Dimensionen von entscheidender Bedeutung: Will man die Entstehung der chemischen Elemente und ihrer verschiedenen Isotope in unserem Universum verstehen und beschreiben, so braucht man dafür Daten über die Eigenschaften ihrer Bestandteile – der Atomkerne.

Die Struktur der Atomkerne untersucht man mit Hilfe von Teilchenbeschleunigern. Man kann die Atomkerne z.B. mit einem Strahl schneller Elektronen oder Ionen beschießen und sie damit aufheizen. Bei der folgenden Abkühlung senden sie eine für das jeweilige Isotop ganz typische Gammastrahlung aus, die mit empfindlichen Nachweisgeräten (Detektoren) gemessen wird und aus der wertvolle Informationen über die Anregungsarten und den Zerfall von Atomkernen abgeleitet werden. Sowohl die so gewonnenen Kenntnisse über instabile Atomkerne (Radionuklide) als auch die verwendete Nachweisteknik, die ursprünglich für kernphysikalische Experimente entwickelt wurde, finden heute eine breite Anwendung, z.B. in der medizinischen Diagnostik mit Computertomographen und bei der Behandlung von Tumoren durch Bestrahlung mit Radionukliden oder an Teilchenbeschleunigern.

Die kernphysikalische Forschung stößt jedoch mit der Entwicklung neuer, leistungsfähiger Beschleuniger und neuer, hochempfindlicher Detektoren in immer weitere, bisher nicht erforschte Bereiche des Mikrokosmos vor.

**Abb. 1:** Blick in die Beschleunigerhalle.

Der Elektronenstrahl läuft von rechts in den Hauptbeschleuniger, dessen zylinderförmiges Gefäß in der Bildmitte zu sehen ist. Im Inneren des Gefäßes befinden sich zwei supraleitende Resonatoren, die die Elektronen mittels eines Hochfrequenzfeldes auf eine Energie von maximal 20 MeV beschleunigen. Bei dieser Energie erreichen die Elektronen etwa 99,992 % der Lichtgeschwindigkeit. Oberhalb des Hauptbeschleunigers sieht man die Zuleitung für das flüssige Helium, mit dem die Resonatoren gekühlt werden. Das äußere Gefäß des Beschleunigers wird mit flüssigem Stickstoff gekühlt, der aus dem Behälter links vom Beschleuniger bezogen wird. Hinter dem Beschleuniger wird der Elektronenstrahl zu den verschiedenen Experimentierplätzen gelenkt.

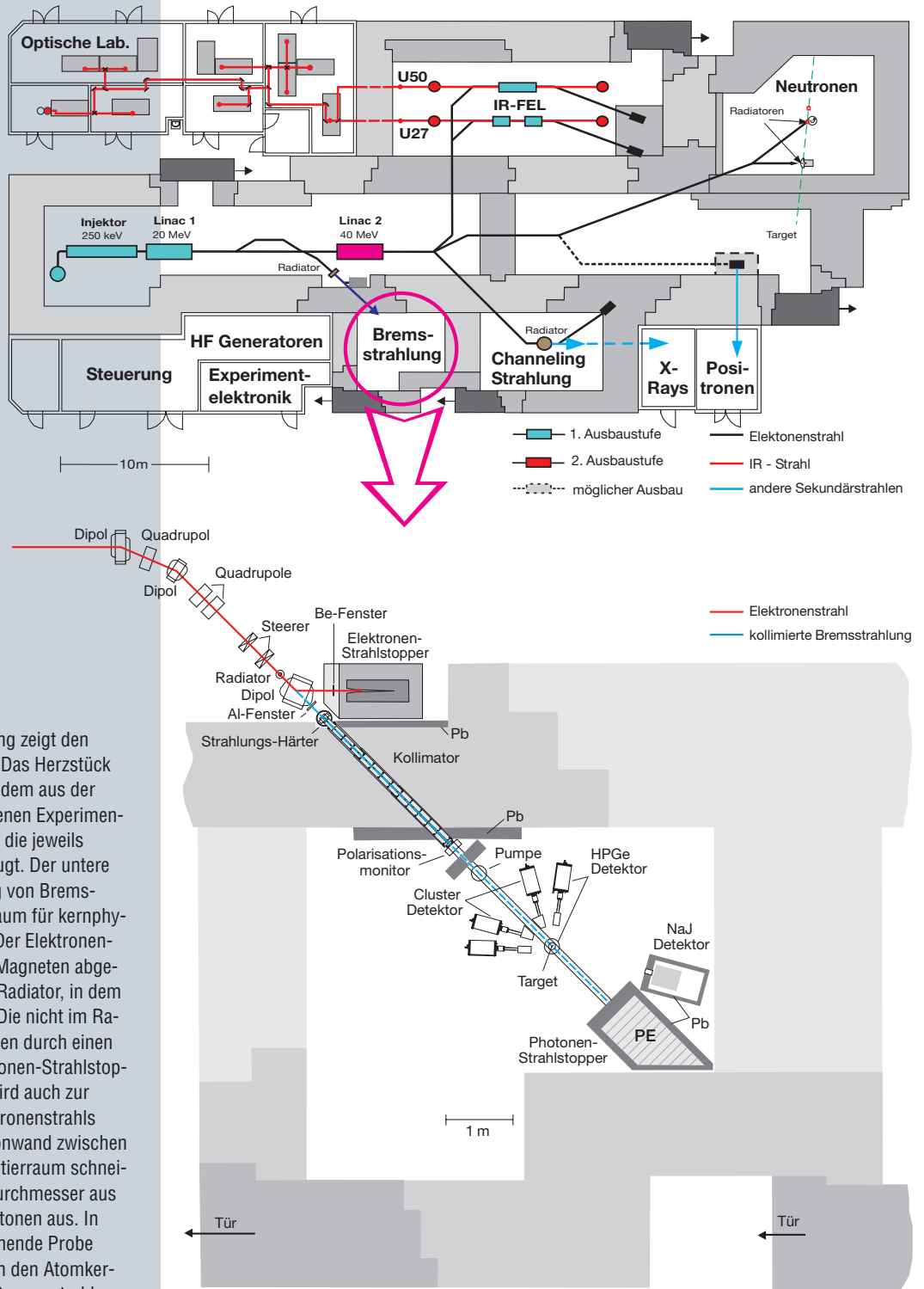


### Experimente mit Photonen am Beschleuniger ELBE

Im Forschungszentrum Rossendorf wurde der leistungsfähige supraleitende Elektronenbeschleuniger ELBE (**E**lektronenbeschleuniger hoher **B**rillanz und geringer **E**mittanz) errichtet, der in Abb. 1 gezeigt ist. Dieser Beschleuniger erzeugt einen Elektronenstrahl mit einer maximalen Energie von 20 Millionen Elektronenvolt (MeV) und einer maximalen Stromstärke von 1 Tausendstel Ampere (mA). Ein MeV ist die Energie, die ein Elektron nach dem Durchlaufen einer Beschleunigungsspannung von einer Million Volt hat. Ein Überblick über die Beschleunigerhalle mit ihren verschiedenen Experimentierplätzen ist in Abb. 2 gegeben. Der Beschleuniger wird zur Erzeugung verschiedener Arten von Sekundärstrahlung benutzt [1], mit denen Strukturuntersuchungen auf verschiedenen Forschungsgebieten ermöglicht werden. Kohärente Strahlung im Infrarotbereich, die in einem Freie-Elektronen-Laser („IR-FEL“) erzeugt wird, soll biophysikalischen und festkörperphysikalischen Untersuchungen dienen. Quasimonochromatische Röntgenstrahlung („Channeling-Strahlung“) wird in biomedizinischen Untersuchungen angewendet. Weiterhin sollen Neutronen und Positronen für Materialuntersuchungen genutzt werden.

Für kernphysikalische Experimente wird der Elektronenstrahl in einen Strahl energiereicher Lichtquanten (Photonen) umgewandelt, die Atomkerne über verschiedene Prozesse in angeregte Zustände versetzen können. Die Photonen können an Atomkernen gestreut werden, hochenergetische Photonen können aber auch Neutronen oder Protonen aus dem Kern herausschlagen (Kernphotoeffekt) oder den Kern spalten (Photospaltung). Einen Photonenstrahl kann man erzeugen, indem man den Elektronenstrahl des Beschleunigers auf eine wenige Millionstel Meter ( $\mu\text{m}$ ) dicke Metallfolie schießt. Die auftreffenden Elektronen werden in der Metallfolie abgebremst und geben dabei Energie in Form von elektromagnetischer Strahlung ab. Diese „Bremsstrahlung“ hat ein kontinuierliches Spektrum, d.h. im Photonenstrahl ist jeder Energiewert zwischen Null und der Energie der auftreffenden Elektronen enthalten.

Strahlungsquelle Elbe



**Abb. 2:** Der obere Teil der Abbildung zeigt den Grundriss der Beschleunigerhalle. Das Herzstück ist der Beschleuniger Linac 1, von dem aus der Elektronenstrahl zu den verschiedenen Experimenterräumen geführt wird. Dort wird die jeweils benötigte Sekundärstrahlung erzeugt. Der untere Teil zeigt die Anlage zur Erzeugung von Bremsstrahlung und den Experimentierraum für kernphysikalische Experimente im Detail. Der Elektronenstrahl wird durch ein System von Magneten abgelenkt, fokussiert und trifft auf den Radiator, in dem die Bremsstrahlung erzeugt wird. Die nicht im Radiator gestoppten Elektronen werden durch einen Magneten abgelenkt und im Elektronen-Strahlstopper aufgefangen. Dieser Magnet wird auch zur Bestimmung der Energie des Elektronenstrahls benutzt. Der Kollimator in der Betonwand zwischen Beschleunigerhalle und Experimentierraum schneidet einen Strahl mit definiertem Durchmesser aus der räumlichen Verteilung der Photonen aus. In diesen Strahl wird die zu untersuchende Probe (das „Target“) eingebracht. Die von den Atomkernen im Target emittierte typische Gammastrahlung wird mit Germanium-Detektoren gemessen. Der Photonen-Strahlstopper fängt schließlich den hinter dem Target noch weiterlaufenden Photonenstrahl auf.

**Abb. 3:** Blick in den Experimentierraum. Der Photonenstrahl kommt von links aus dem Kollimator, der sich in der Wand zwischen Beschleunigerhalle und Experimentierraum befindet (vgl. Abb. 2). In der Mitte des Bildes sieht man das schwarze Plastik-Strahlrohr, das den Kollimator mit dem Photonen-Strahlstopper verbindet, dessen gelbe Frontseite rechts im Bild zu sehen ist. Das Target befindet sich im Strahlrohr und wird von vier Germanium-Detektoren beobachtet. Zwei dieser Detektoren sind senkrecht über bzw. unter dem Target angeordnet. Sie sind an den blauen Gefäßen zu erkennen, die flüssigen Stickstoff zur Kühlung der Germanium-Kristalle enthalten. Ein waagrecht montierter Detektor ist vorn im Bild zu sehen. Er blickt unter einem Winkel von 127 Grad zum Photonenstrahl auf das Target. Drei weitere Detektoren sind ebenfalls horizontal unter verschiedenen Winkeln zum Strahlrohr angebracht, sind aber im Bild nicht sichtbar (vgl. Abb. 2). Zwei der horizontalen Detektoren sind auf fahrbaren Gestellen montiert, so dass die Winkel zum Strahlrohr variiert werden können. Die Germanium-Detektoren sind zur Unterdrückung von unvollständig registrierten Signalen mit Szintillationsdetektoren umgeben, die über jeweils acht im Bild sichtbare Photovervielfacher ausgelesen werden. Die Szintillationsdetektoren wiederum haben einen Bleimantel gegen störende Strahlung von außen. Außerdem sind die Detektoren durch dicke Bleiwände gegen das Strahlrohr abgeschirmt. Diese Bleiwände enthalten in der Mitte ein Kollimatorloch, das nur die direkte Strahlung vom Target passieren läßt.

Die erzeugten Photonen haben eine breite räumliche Verteilung. Für die Experimente wird aber ein gerichteter Strahl mit einem gewünschten Durchmesser benötigt. Ein solcher Strahl wird aus der räumlichen Verteilung der erzeugten Photonen mittels eines Kollimators, einer Art Blende, ausgeschnitten. Dieser Kollimator besteht aus mehreren Zylindern mit einer durchgehend konischen Bohrung (siehe Abb. 2). Er ist 2,60 m lang und befindet sich in der Betonwand zwischen der Beschleunigerhalle und dem Experimentierraum. Die große Länge des Kollimators in Verbindung mit der dicken Betonwand bewirkt eine starke Schwächung der Strahlung, die nicht das Kollimatorloch trifft. Als Material für den Kollimator wurde Reinstaluminium gewählt, um die unerwünschte Erzeugung von Neutronen im Kollimator durch den Kernphotoeffekt vergleichsweise gering zu halten.

Der Photonenstrahl läuft sowohl im Kollimator als auch im Experimentierraum in einem Strahlrohr im Vakuum, um eine Streuung der Photonen an Luftmolekülen, die eine störende Streustrahlung hervorruft, zu vermeiden. Etwa in der Mitte des Experimentierraums ist die zu untersuchende Probe, das Target, im Strahlrohr angebracht. Die „Antwort“ der Atomkerne auf die Bestrahlung ist eine typische Gammastrahlung, die von hochempfindlichen Germanium-Detektoren registriert wird. Die in unseren ersten Experimenten benutzte Anordnung von Germanium-Detektoren ist in Abb. 3 gezeigt.

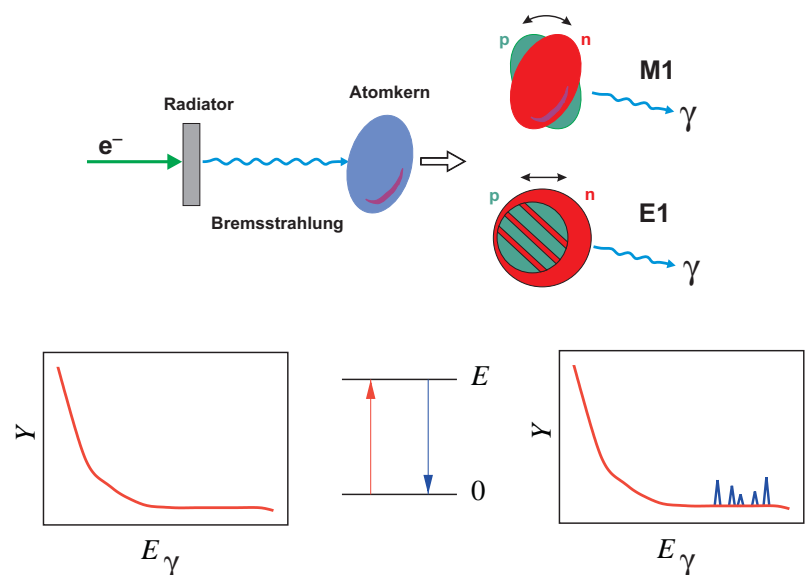


## Ergebnisse erster kernphysikalischer Experimente an ELBE

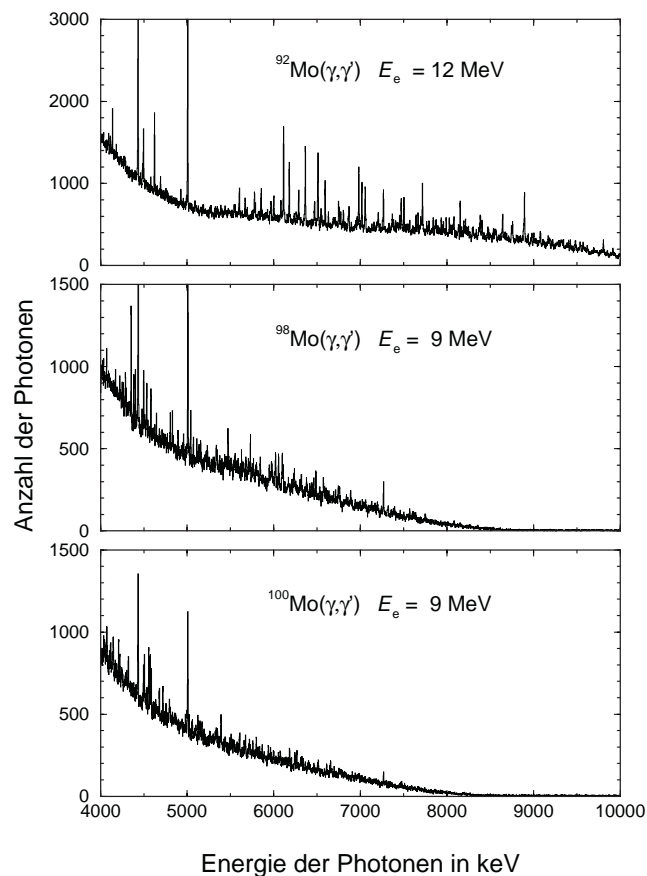
**Abb. 4:** Vereinfachte schematische Darstellung der Kernresonanzfluoreszenz. Die im Radiator erzeugte Bremsstrahlung trifft auf einen Atomkern im Target und versetzt diesen in einen angeregten Zustand mit einer bestimmten Bewegungsform. Bei der anschließenden Abregung sendet er eine charakteristische Gammastrahlung aus. Als Beispiel sind zwei bereits bekannte Bewegungsformen bei Anregungsenergien von 3 bis 7 MeV gezeigt. In einem deformierten Kern können die Protonen scherenartig gegen die Neutronen schwingen, was zur Aussendung charakteristischer magnetischer Dipolstrahlung (M1-Strahlung) führt. In einem Kern mit viel mehr Neutronen als Protonen können die Neutronen gegen die Protonen hin und her schwingen, was die Aussendung elektrischer Dipolstrahlung (E1-Strahlung) zur Folge hat. Im unteren Teil des Bildes ist links die vereinfachte Form des Bremsstrahlungsspektrums gezeigt. Trifft ein Photon mit der passenden (resonanten) Energie (roter Pfeil) den Targetkern, kann es ein Kernniveau mit der Anregungsenergie  $E$  anregen (siehe Mitte des unteren Bildes). Dieses Niveau regt sich unter Aussendung eines Photons der gleichen Energie (blauer Pfeil) ab. Man beobachtet solche Resonanzen als Spitzen (Peaks) bei den entsprechenden Energien im gemessenen Photonenspektrum (blau im Bild unten rechts). Zusätzlich misst man auch eine Untergrundstrahlung, die von hier nicht interessierenden Prozessen herrührt (rot im rechten Bild).

Das Ensemble aus dem ELBE-Beschleuniger und dem beschriebenen experimentellen Aufbau stellt uns neuartige Bedingungen für Experimente mit Bremsstrahlung bereit: Die Verfügbarkeit hoher Elektronenstrahlenergien von bis zu 20 MeV erlaubt die Untersuchung von Atomkernen bei einer hohen Anregungsenergie und damit die Suche nach neuen physikalischen Phänomenen. Der hohe maximale Strom des Beschleunigers von bis zu 1 mA sorgt dabei für eine große Intensität der Bremsstrahlung. Die an ELBE mögliche Pulsung des Elektronenstrahls ermöglicht sowohl die Unterdrückung verzögerter Untergrundstrahlung als auch die Untersuchung langlebiger Anregungszustände der Atomkerne. Die dicke Betonwand zwischen Beschleunigerhalle und Experimentierraum, die Abschirmung der Detektoren sowie die Auswahl spezieller Materialien für den Kollimator, das Strahlrohr, den Photonen-Strahlstopper und die Detektorgestelle führen zu einer Minimierung störender Streustrahlung. Der variable Detektoraufbau erlaubt die Nutzung der Detektoren für spezielle Messaufgaben wie die Messung von Winkelverteilung und Polarisation der emittierten Gammastrahlung.

Die ersten Experimente mit Bremsstrahlung waren der Beginn des Experimentierprogramms am ELBE-Beschleuniger überhaupt. Für den Beschleuniger bedeutete das erstmals eine längere Laufzeit mit Energie- und Stromwerten, die von den Nutzern vorgegeben wurden. Die ersten Wochen mit täglicher Strahlzeit beinhalteten daher Testmessungen, die sowohl der Optimierung unseres experimentellen Aufbaus als auch dem Langzeittest der Beschleunigerkomponenten dienen, der beim Auffinden und Beseitigen von Fehlerquellen half. Anschließend konnte mit Experimenten begonnen werden, die Bestandteil unseres physikalischen Forschungsprogramms sind. Die Messungen hatten die Untersuchung von Anregungsmoden in einer Reihe von Molybdän-Isotopen mit der Methode der Kernresonanzfluoreszenz, die in Abb. 4 vereinfacht dargestellt ist, zum Ziel. Hierbei werden Atomkerne im Target durch auftreffende Photonen in angeregte Energiezustände versetzt. Bei der anschließenden Abregung senden die Atomkerne eine charakteristische Gammastrahlung aus, die Informationen über die Eigenschaften der Atomkerne liefert.



In vorangegangenen Experimenten am Dynamitron-Beschleuniger der Universität Stuttgart waren diese Isotope bis zu Anregungsenergien von 4 MeV vermessen worden [2]. In den Experimenten an ELBE konnte die Struktur dieser Isotope nun erstmals bei höheren Anregungsenergien untersucht werden. Solche Experimente mit Elektronenenergien größer als 10 MeV sind gegenwärtig nur am ELBE-Beschleuniger möglich. In den Experimenten zu den Molybdän-Isotopen  $^{92}\text{Mo}$ ,  $^{98}\text{Mo}$  und  $^{100}\text{Mo}$  konnte eine Vielzahl von Resonanzen bei Anregungsenergien oberhalb 4 MeV bis zur Neutronenseparationsenergie erstmals beobachtet werden. Beispiele für die gemessenen Energiespektren sind in Abb. 5 gezeigt. Es ist deutlich zu erkennen, dass das leichte Isotop  $^{92}\text{Mo}$  (Neutronenzahl  $N=50$ ) große Resonanzen (Peaks) zeigt, während sich die Intensität der Dipolstrahlung mit zunehmender Neutronenzahl der Isotope ( $N=56$  für  $^{98}\text{Mo}$  und  $N=58$  für  $^{100}\text{Mo}$ ) über viele kleine Peaks verteilt. Dies veranschaulicht den Einfluss der Neutronenzahl auf die Kernstruktur. Eine quantitative Auswertung der einzelnen Peaks, mit der z.B. die Drehimpulse und die Lebensdauern der angeregten Kernzustände bestimmt werden, wird gegenwärtig durchgeführt und wird den Vergleich mit Vorhersagen theoretischer Modelle erlauben. Aus der Analyse der Intensitätsverteilung der Dipolanregungen in diesen Kernen können neue Erkenntnisse über die Struktur der Atomkerne gewonnen werden. Das Isotop  $^{92}\text{Mo}$  ist darüberhinaus auch von astrophysikalischem Interesse, da es nicht durch die Standardprozesse der Elemententstehung erzeugt werden konnte.

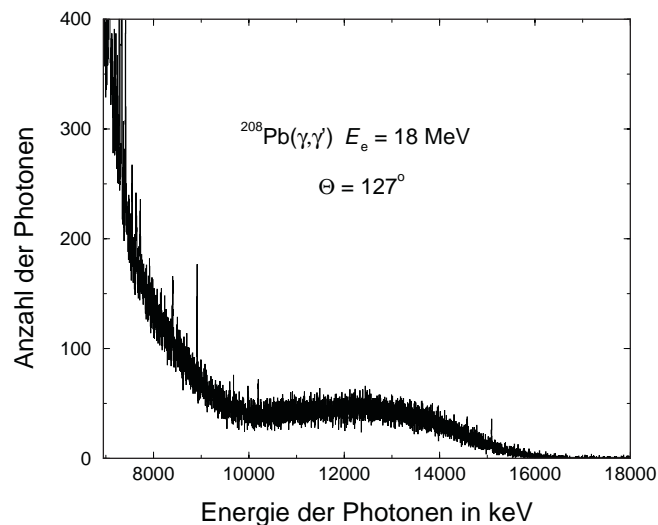


**Abb. 5:** Photonenspektren, die bei der Bestrahlung der Isotope  $^{92}\text{Mo}$ ,  $^{98}\text{Mo}$  und  $^{100}\text{Mo}$  unter 127 Grad zum einfallenden Photonenstrahl am Beschleuniger ELBE gemessen wurden. Die Messzeiten betragen etwa 90 Stunden für jedes Spektrum. Die Elektronenenergie entspricht etwa der jeweiligen Neutronenseparationsenergie, d.h. 12 MeV für  $^{92}\text{Mo}$  und 9 MeV für  $^{98}\text{Mo}$  und  $^{100}\text{Mo}$ . Die zwei großen Peaks bei 4445 und 5020 keV in allen Spektren entstammen dem Eichpräparat  $^{11}\text{B}$ , das mit dem jeweiligen Target kombiniert wurde.

**Abb. 6:** Photonenspektrum, das bei der Bestrahlung von  $^{208}\text{Pb}$  am ELBE-Beschleuniger gemessen wurde. Die Elektronenenergie betrug 18 MeV, die Messzeit 15 Stunden. Die Peaks bis etwa 8000 keV sind aus früheren Arbeiten bekannt [3]. Die Peaks bei 8410 und 8921 keV entstammen dem Eichpräparat  $^{11}\text{B}$ .

### Erste Erfahrungen mit ELBE und Ausblick

In einem weiteren Experiment wurde die hohe Energie des Beschleunigers ausgenutzt und eine Probe aus dem Bleisotop  $^{208}\text{Pb}$  mit einem Elektronenstrahl der Energie 18 MeV bestrahlt. Damit wurde dieses Nuklid mit einer Energie weit oberhalb der Neutronen- und Protonenseparationsenergien angeregt. Neben der resonanten Streuung der Photonen wird damit auch die Emission von Neutronen oder Protonen ermöglicht. Man beobachtet also auch den Kern-Photoeffekt. Hierbei ist bisher ungeklärt, inwieweit man überhaupt die Abregung der Kernzustände durch Photonen in Konkurrenz zur Teilchenemission beobachten kann. Im Spektrum in Abb. 6 deutet sich eine breite Intensitätserhöhung im Energiegebiet der Riesenresonanz zwischen 10 und 16 MeV an, die gegenwärtig in weiteren Experimenten untersucht wird.



Die Erzeugung von Bremsstrahlung für kernspektroskopische Untersuchungen ist die erste Anwendung des ELBE-Beschleunigers und damit ein wichtiger Prüfstein für die Konzeption der Anlage. Dabei forderten die Experimente der Kernstrukturphysik zwei wichtige Eigenschaften von ELBE. Einerseits musste bereits von Beginn an ein relativ hoher und stabiler Strahlstrom (bis zu  $600 \mu\text{A}$ ) erzeugt werden und außerdem musste dieser Betriebsmodus über lange Messzeiten (8 - 16 Stunden täglich) mit stabilen Strahlparametern und hoher Verfügbarkeit gewährleistet werden. In den Nachtschichten wurde ELBE erstmalig von Operateuren und Technikern gesteuert, nachdem bereits in der Tagsschicht die Betriebsparameter von Physikern und Ingenieuren eingestellt und optimiert wurden. Auch in dieser Hinsicht war das für den ELBE-Beschleuniger der Übergang zum Routinestrahlbetrieb. Bis Ende Oktober 2003 wurden etwa 1100 Stunden Nutzerstrahlzeit für kernspektroskopische Untersuchungen absolviert. In ca. 85 % der geplanten Strahlzeit stand der ELBE-Strahl auch tatsächlich zur Verfügung. Notwendige technische Verbesserungen am Bremsstrahltarget, am Maschinensicherheitssystem sowie an der Steuerungssoftware wurden in den Strahlzeitpausen durchgeführt.



Die ersten Experimente mit dem Bremsstrahlungsmessplatz am Beschleuniger ELBE haben Daten geliefert, aus denen neuartige Erkenntnisse über die Struktur der Kerne und über die Entstehungsprozesse der Isotope im Kosmos erwartet werden können. In künftigen Experimenten werden diese Untersuchungen systematisch fortgesetzt. Dabei können zusätzliche experimentelle Techniken wie die Nutzung polarisierter Bremsstrahlung und die Photoaktivierung eingesetzt werden. Darüberhinaus ist ein Experimentaufbau zur Spektroskopie neutronenreicher Isotope geplant, die durch Photospaltung erzeugt werden. Aus der Untersuchung solcher Isotope weitab der Kernstabilität erwarten wir neue Informationen über die Gültigkeit theoretischer Modelle zur Kernstruktur und zur Beschreibung der Elementsynthese im Universum.

Der Aufbau und die Durchführung der beschriebenen Experimente sind die gemeinsame Arbeit der Mitarbeiter der Abteilung Kernphysik, F. Döna, M. Erhard, E. Grosse, A. Hartmann, A. Junghans, L. Käubler, K. Kosev, G. Rusev, K.D. Schilling, W. Schulze, R. Schwengner und A. Wagner. Der Aufbau der Strahlführung in der Beschleunigerhalle und die technische Realisierung wichtiger Komponenten, insbesondere der gekühlten und motorgesteuerten Radiatorhalterung, der Steerer-Magnete, der Einrichtung zum Strahlrohrverschluss, des Elektronenstrahl-Stoppers und der Elemente zur Elektronenstrahl-Diagnostik wurden von der Zentralabteilung Forschungstechnik und der Zentralabteilung Strahlungsquelle ELBE durchgeführt. Für diese entscheidenden Arbeiten möchten wir uns an dieser Stelle bedanken. Den Kollegen der Zentralabteilung Strahlungsquelle ELBE danken wir außerdem für die effektive Zusammenarbeit während der Durchführung der Experimente am ELBE-Beschleuniger. Die Betriebserfahrungen mit ELBE (s. vorangegangener Abschnitt) wurden durch Peter Michel zusammengefasst.

**Literatur:**

- [1] U. Lehnert, P. Michel, J. Teichert, Forschung für Mensch und Umwelt 2001/2002, FZR-349 (2003), S. 43
- [2] G. Rusev u.a., Jahresbericht 2002, FZR-372 (2003), S. 34, 35
- [3] N. Ryezayeva u.a., Physical Review Letters. 89 (2002), S. 272502

**Ein Weg und viele Ziele:**

**Die molekularen Mechanismen des Sehens  
geben Aufschluss über allgemeine Prinzipien  
der zellulären Signalverarbeitung >>**



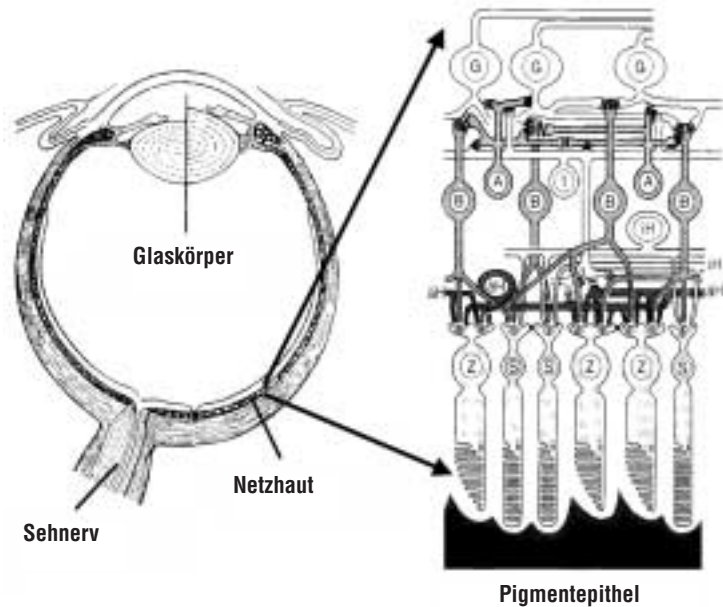
**Ein Weg und viele Ziele:**

## **Die molekularen Mechanismen des Sehens geben Aufschluss über allgemeine Prinzipien der zellulären Signalverarbeitung**

Karim Fahmy

Die Fülle an Information, die wir über das Sehen aufnehmen, wird von keiner anderen Sinnesqualität übertroffen und verleiht dieser Wahrnehmungsleistung, mit der wir uns im wörtlichen Sinn ein Bild von der Umwelt machen, eine Sonderstellung. Im Laufe der Evolution sind aufgrund des mit dieser Fähigkeit verbundenen enormen Überlebensvorteils hochgradig optimierte abbildende Lichtsinnesorgane hoher Sensitivität entstanden. Einerseits können bei schwächster Dämmerung einzelne Photonen, also die kleinstmöglichen Energiepakete des Lichts, von unseren Sehzellen wahrgenommen und andererseits können milliardenfach höhere Lichtenergien, wie sie beispielsweise von großen reflektierenden Schnee- und Eisflächen bei starkem Sonneneinfall ausgehen, verarbeitet werden. Die zentrale lebenspraktische Rolle, die das Sehen für unsere Orientierung im Raum und die Aufnahme visueller Information spielt, ist evident. Darüber hinaus ist die Fähigkeit zu Sehen wie keine andere menschliche Sinnesleistung mit großem Symbolgehalt belegt worden. Licht und Finsternis sind ein zentrales Gegensatzpaar kosmogonischer Vorstellungen und mit dem Erblicken des Lichtes der Welt beschreiben wir den Beginn eines Menschenlebens. Es ist neben der für unsere Lebenspraxis zentralen Funktion des Sehens vor allem die nicht-stoffliche Natur des Lichtes, die es in verschiedenen Hochkulturen zum Sinnbild einer außerhalb der gewöhnlichen Materialität stehenden Größe hat werden lassen. Wie aber erfolgt die Umsetzung dieses mit unseren stofflichen Vorstellungen von Materie so schwer fassbaren physikalischen Reizes in die Welt der Biochemie, die die Grundlage jeder neurobiologischen Leistung ist? Überraschenderweise benutzt die Natur für die Lichtdetektion molekulare Mechanismen, auf denen auch die Verarbeitung völlig anderer Reizqualitäten beruht. Der Einsatz moderner Infrarotstrahlungsquellen und spektroskopischer Verfahren trägt dazu bei, die molekularen Prozesse der Lichtrezeption besser zu verstehen und allgemeine Funktionsprinzipien der biologischen Signalverarbeitung zu charakterisieren.

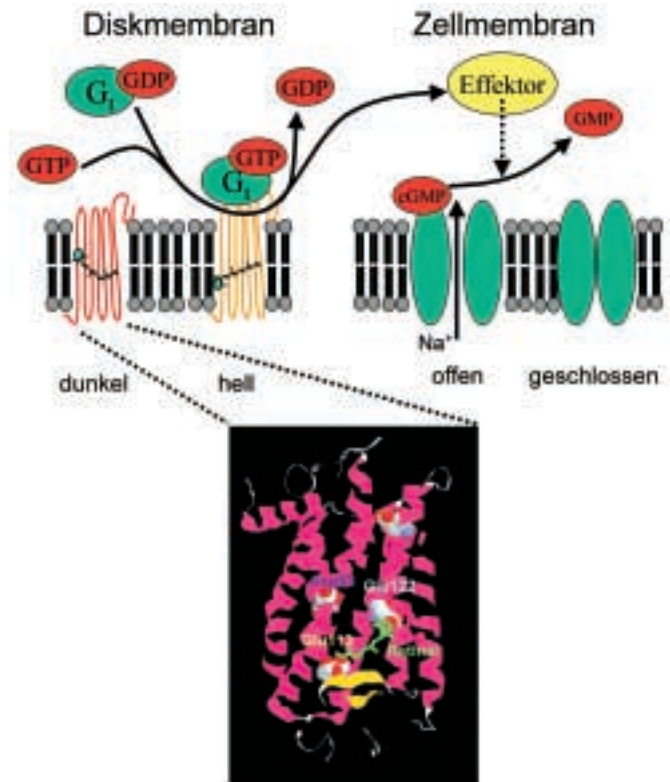
**Abb. 1:** Querschnitt durch das Wirbeltierauge. Licht, das von einem Gegenstand ausgeht, wird durch Hornhaut (C) und Linse (L) gebrochen und erzeugt so ein verkleinertes und invertiertes Bild des Gegenstandes auf der Netzhaut (Retina). Bevor das Licht die für das Farb- und Dämmerungssehen verantwortlichen Zapfen- (Z) bzw. Stäbchenzellen (S) erreicht, durchdringt es eine dreilagige Schicht von Nervenzellen, die bereits eine wesentliche Verrechnung der elektrischen Signale der Sinneszellen leisten, bevor die zentralnervöse Bildverarbeitung im Gehirn erfolgt. In den Membranstapeln (Diskmembranen) im Innern der Stäbchenzellen liegt der Sehfärbstoff Rhodopsin dicht gepackt vor (etwa 30 Milliarden Moleküle pro  $\text{mm}^2$ ); etwa 1000 Membranstapel befinden sich in einer Stäbchenzelle. Dies ermöglicht eine hohe Effizienz der Lichtabsorption. Das Pigmentepithel dient unter anderem der optischen Isolation der Sehzellen.



## Molekulare Grundlagen des Sehens

Die Verbindung zwischen der elektromagnetischen Natur des Lichtes und der auf chemischen Stoffwechsellösungen von Nervenzellen beruhenden, elektrophysiologischen Reizverarbeitung zu klären, war eine der großen Herausforderungen der Sinnesphysiologie. Der Nachweis einer lichtinduzierten chemischen Veränderung in der Netzhaut (Retina) gelang im 19. Jahrhundert mit der Beobachtung einer lichtabhängigen Farbveränderung im „Sehpurpur“. Dieser purpurfarbene Sehfärbstoff, Rhodopsin, liegt in stapelförmigen Zellmembranstrukturen (Diskmembranen) in spezialisierten Sinneszellen der Retina vor (Abb. 1). Er besteht aus einem mehrere hundert Aminosäuren enthaltenden Eiweiß (Protein), das in Form von Vitamin A (11-*cis*-Retinal) einen chemisch gebundenen Farbstoff trägt. Dieser Farbstoff absorbiert grünes Licht mit einer Wellenlänge von 500 Nanometern (ein Nanometer entspricht einem Millionstel Millimeter) besonders gut, nimmt also die Energie der elektromagnetischen Welle auf. In den vergangenen Jahrzehnten wurde das Rinderhodopsin aus den für das lichtempfindliche Dämmerungssehen verantwortlichen Stäbchenzellen intensiv mit physikalischen und chemischen Methoden untersucht, da es in großer Menge gewonnen werden kann. Als primäre Reaktion wurde die lichtinduzierte Formveränderung des Farbstoffes (eine Photoisomerisierung von 11-*cis* nach all-*trans*-Retinal) identifiziert, die sich auf das Protein überträgt. Diese neue Proteinstruktur ist die Grundlage für alle physiologischen Folgereaktionen in den Lichtsinneszellen unserer Retina, die schließlich eine elektrische Reizantwort generieren. Bei dem Signalumwandlungsprozess spielen sogenannte G-Proteine eine wichtige Rolle. Ohne selbst lichtempfindlich zu sein, „erkennen“ sie die lichtaktivierte Form des Rhodopsins, indem sie sich nur an diese anlagern. Dadurch werden G-Proteine ihrerseits durch eine Strukturänderung aktiviert

**Abb. 2:** Schema der Signalweitergabe von lichtaktiviertem Rhodopsin an Komponenten des Zellinnern. Transduzin (Gt), das G-Protein der Stäbchenzelle, bindet an lichtaktiviertes Rhodopsin. Dadurch erfolgt der Austausch eines kleineren gebundenen Moleküls (Guanosindiphosphat, GDP) gegen ein Guanosintriphosphat (GTP). Dies ist mit einer Formveränderung des Transduzins verbunden, das sich vom Rezeptor löst und in seiner neuen Konformation ein Effektor-Enzym (eine Phosphodiesterase) aktiviert. Dies wandelt seinerseits zyklisches Guanosinmonophosphat (cGMP) in Guanosinmonophosphat um. cGMP wird benötigt, um einen Einstrom von Natrium in das Stäbchenaußensegment durch einen Ionenkanal in der Zellmembran aufrechtzuerhalten. Dieser Strom kommt durch den Abbau von cGMP zum Erliegen und es folgt ein Absenken der elektrischen Spannung über der Stäbchenzellmembran, was die elektro-physiologische Antwort auf den Lichtreiz darstellt. Im unteren Teil der Abbildung ist die röntgenkristallographisch bestimmte Dunkelstruktur von Rhodopsin gezeigt (Palczewski u.a., 2000, Science 289, S. 739). Teile der sieben helikalen Proteinsegmente, die die Diskmembran durchspannen, sind entfernt, wodurch das lichtabsorbierende 11-*cis*-Retinal im Innern des Proteins erkennbar ist. Einzelne Aminosäuren sind markiert, deren Ladungszustand (neutrale COOH oder negativ geladene COO<sup>-</sup> Carboxylgruppen) anhand der IR-Absorption ihrer C=O Gruppen bestimmt (siehe Abb. 3).



und können so andere zelluläre Proteine (Effektoren) in ihrer Fähigkeit, chemische Reaktionen zu beschleunigen, regulieren. Dieser kaskadenartige Signalweg (Abb. 2) führt zu einer Signalverstärkung und zur Signalumwandlung. Am Ende der Reaktionskette erfolgt die Konzentrationsänderung eines organischen Moleküls, des zyklischen Guanosin-Monophosphats (cGMP), das die elektrische Leitfähigkeit von Kanalproteinen in der Zellmembran der Sehzelle reguliert und so schließlich die elektrische Antwort nach einem Lichtreiz auslöst. Unter Beibehalt dieses allgemeinen Reizaufnahme- und Reizwandlungsprozesses bewirken einzelne Aminosäureaustausche (Mutationen) im Rhodopsin eine Verschiebung des Absorptionsmaximums von 11-*cis*-Retinal, wodurch rot-, grün- und blausensitive Rezeptortypen entstehen, die die Grundlage des Farbensehens bilden und den Spektralbereich von etwa 400 - 700 nm (Nanometer) abdecken.

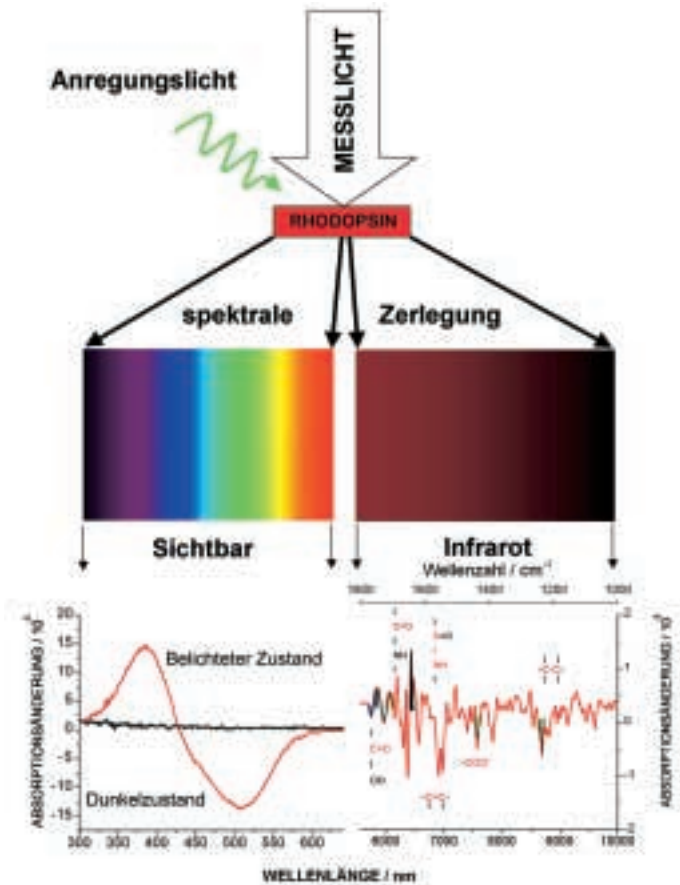
## Variationen über ein Thema

Signalwege, in denen Rezeptoren der Zellmembran mit G-Proteinen des Zellinnern „kommunizieren“, waren evolutionär sehr erfolgreich und finden sich heute in Zellen nahezu aller Gewebe, wo sie insbesondere die Wirkung von Hormonen vermitteln, aber auch der Geschmacks- und Geruchsaufnahme dienen. Aus der Gruppe dieser so genannten G-Protein-gekoppelten Rezeptoren ist der Sehfärbstoff am besten untersucht und namensgebend für eine Gruppe evolutionär verwandter Rezeptoren, unter denen sich solche für Hormone finden. In diesen Fällen erzeugen die genannten Substanzen anstelle des Lichts die aktive Rezeptorstruktur. All diese Rezeptoren sind pharmakologisch von großer Bedeutung. An ihnen greifen Wirkstoffe an, die Wachstum, Differenzierung und Stoffwechsel von Zellen beeinflussen. Umgekehrt können Rezeptordefekte verschiedene Krankheiten und Krebsarten verursachen. Wegen des sehr allgemeinen Funktionsprinzips der G-Protein-abhängigen Signaltransduktion hat in den letzten Jahren die Untersuchung des Rhodopsins eine Bedeutung erlangt, die weit über das unmittelbare Verständnis des Sehvorgangs hinaus geht. Vielmehr erwartet man sich von der molekularen Analyse der Photoaktivierung von Rhodopsin allgemeingültige Erkenntnisse über die molekularen Mechanismen, mit denen Hormone oder Pharmaka ihre jeweiligen Rezeptoren aktivieren. Da Mutationen in solchen Rezeptoren mit verschiedenen Krankheiten und einigen Krebsarten in Zusammenhang stehen, ist die Forschung auf dem Gebiet der molekularen Struktur-Funktions-Zusammenhänge in G-Protein-gekoppelten Rezeptoren (GPCRs) von großem medizinischen Interesse. Im Falle des Sehvorgangs kann also ein zellulärer Signalweg molekular studiert werden, der unter Erhalt der wesentlichen Komponenten und Interaktionsprinzipien von der Natur vielfach genutzt wird und zu den verschiedensten „Zielen“ führen kann.

## Infrarotlicht gibt Einblicke in molekulare Strukturen

Die für den molekularen Mechanismus der rhodopsinartigen GPCRs zentrale Frage betrifft die Art der Strukturänderung, die der Sehfärbstoff nach Belichtung erfährt. Seit drei Jahren ist die Raumstruktur des unbelichteten Rhodopsins als bislang einzige Struktur eines GPCR röntgenkristallographisch aufgeklärt (Abb. 2). Die Röntgenkristallographie erlaubte jedoch noch keine direkte Beobachtung der lichtabhängigen Strukturänderungen. Bereits vor der Strukturaufklärung hat sich die Infrarotspektroskopie als struktursensitive Methode von großem Wert für die Analyse von Konformationsänderungen in Proteinen und insbesondere in Rhodopsinen erwiesen. Infrarotlicht (IR) liegt mit Wellenlängen größer 1000 nm in dem für uns nicht mehr sichtbaren Spektralbereich jenseits des Roten. Es besitzt eine zu geringe Energie, um eine Photoisomerisierung unseres Sehfärbstoffes auszulösen, kann aber Schwingungen der chemisch gebundenen Atome und Atomgruppen anregen. Die Frequenz dieser Schwingungen ist durch die Bindungsstärke, die Struktur und die Masse der beteiligten chemischen Gruppen bestimmt. Damit ergibt sich die Möglichkeit, Strukturänderungen anhand der natürlichen Schwingungseigenschaften von Biomolekülen im Allgemeinen als Frequenzverschiebungen im Infrarotspektrum zu verfolgen. Im Forschungszentrum Rossendorf werden Methoden entwickelt, dieses Verfahren unter Ausnutzung neuer IR-Strahlquellen zur Beobachtung von Strukturänderungen in

**Abb. 3:** Schema der spektroskopischen Analyse der Strukturänderung von Rhodopsin. Ein Messlichtstrahl wird von der Probe teilweise absorbiert und in seine einzelnen spektralen Komponenten zerlegt. Im Falle sichtbaren Lichtes (linke Hälfte) sind dies die unterschiedlichen Farbanteile, im Falle des IR-„Lichtes“ (rechte Hälfte) die entsprechenden nicht sichtbaren Frequenzanteile. Im Falle von Rhodopsin löst die Belichtung eine Strukturänderung aus, die sowohl die sichtbare Absorption als auch die IR-Absorption verändert (rote Kurven). Dies verursacht Absorptionsabnahmen des Ausgangszustandes und -zunahmen durch die Absorption des neu entstandenen Zustandes. Das sehr schwache sichtbare Messlicht löst keine Photoreaktion aus (schwarze Linie). Diese Differenzspektroskopie weist nur solche Prozesse nach, die mit der Veränderung des biologischen Funktionszustands zusammenhängen, da unveränderte Proteinbereiche nicht zu den gemessenen Absorptionsdifferenzen beitragen. Die Isomerisierung des Retinals führt zur Abnahme der charakteristischen Absorption um  $1240\text{ cm}^{-1}$  (grüne Markierung). Markant für die so erzeugte neue Proteinstruktur ist die Absorptionszunahme um  $1640\text{ cm}^{-1}$  (schwarze Markierung). Einige der IR-Absorptionen sind mittels genetisch modifizierter Rhodopsine einzelnen Aminosäuren zugeordnet worden (Fahmy u.a., 1993, Proc. Natl. Acad. Sci. 90, S. 10206; Fahmy u.a., 2000, Biochemistry 39, S. 10607). Insbesondere handelt es sich bei den Banden zwischen  $1700$  und  $1800\text{ cm}^{-1}$  um Absorptionen von Carboxylgruppen, die nach Belichtung des Rhodopsins protoniert werden (Glutaminsäure Glu113: gelb), oder eine Änderung ihrer Wasserstoffbrückenbindung zu anderen Gruppen des Proteins erfahren (Glutaminsäure Glu122: hellblau und Asparaginsäure Asp83: dunkelblau). Diese Gruppen sind in Abb. 2 als Kalottenmodell dargestellt. Die IR-spektroskopische Unterscheidung zwischen COOH- und  $\text{COO}^-$ -Gruppen ist röntgenkristallographisch nicht möglich und zeigt, dass Umstrukturierungen innermolekularer H-Brücken wohl wesentlich zur Stabilisierung der neuen Proteinstruktur beitragen.



Biomolekülen in Zeitskalen von Pikosekunden (abgekürzt ps, es handelt sich um den Billionsten Teil einer Sekunde) bis Sekunden und unter möglichst nativen Bedingungen zu beobachten. Abbildung 3 zeigt am Beispiel von Rhodopsin die durch Belichtung verursachte Absorptionsänderung des Sehfärbstoffes im sichtbaren Spektralbereich und im mittleren Infrarot ( $5\text{--}10\text{ }\mu\text{m}$ , entspr.  $2000\text{--}1000\text{ cm}^{-1}$ ), das besonders aufschlussreich für Strukturuntersuchungen ist. Verschiedene Frequenzbereiche sind charakteristisch für die Schwingungen verschiedener chemischer Gruppen, sogenannter Gruppenschwingungen, von denen einige in Abbildung 3 in ihrem typischen Frequenzbereich aufgeführt sind. Rhodopsin erfährt durch Belichtung IR-Absorptionsänderungen in all diesen Frequenzbereichen, woraus ersichtlich ist, dass verschiedene chemische Gruppen in ihrer räumlichen Struktur verändert werden. Das betrifft selbstverständlich die räumliche Anordnung des Retinals, dessen Isomerisierung hauptsächlich für die Absorptionsänderungen zwischen



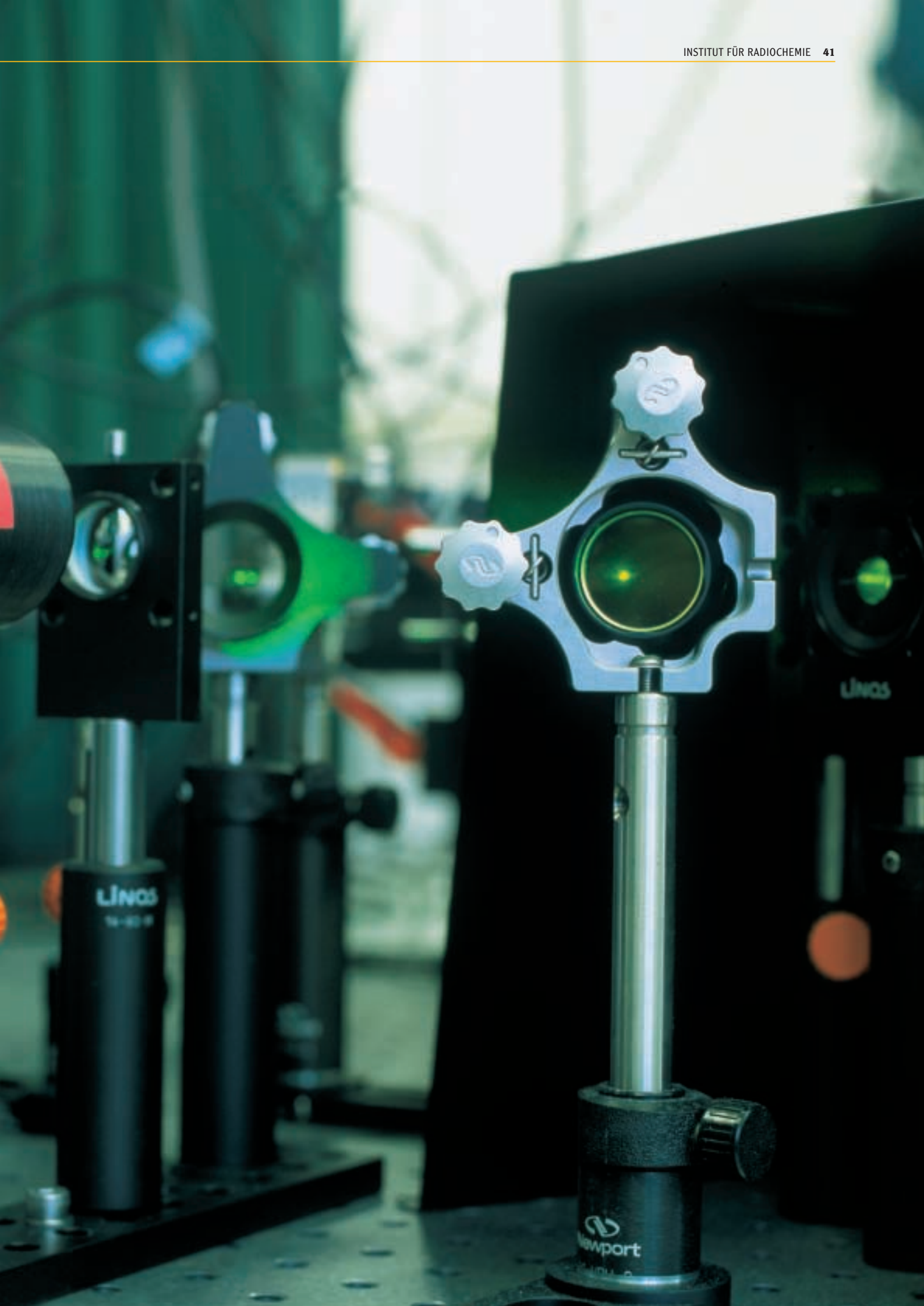
1000 und 1300  $\text{cm}^{-1}$  verantwortlich ist, aber eben auch Gruppen des Proteingerüsts mit IR-Absorptionen zwischen 1500 und 1700  $\text{cm}^{-1}$ . Hier bildet sich der biologische Funktionszustand des Rhodopsins ab und es kann durch Vergleich mit genetisch, biochemisch oder physikalisch manipulierten Rhodopsinproben untersucht werden, ob diese Eingriffe die aktivierenden Strukturänderungen des Moleküls begünstigen oder hemmen. Insbesondere konnte so die Rolle einzelner Aminosäuren bei der Regulation der Gesamtstruktur des Sehfärbstoffes geklärt werden. Hier sind evolutionär konservierte Aminosäuren besonders interessant, also solche Proteinbausteine, die in verschiedenen Rezeptoren immer wieder an der gleichen „Stelle“ auftreten. Mit Hilfe der IR-Spektroskopie konnte gezeigt werden, dass eine dieser konservierten Gruppen durch Aufnahme eines Protons (eines  $\text{H}^+$ -Ions aus dem umgebenden Wasser) zur Umstrukturierung der Rezeptoroberfläche beiträgt. Solche Details können röntgenkristallographisch nicht aufgelöst werden und begründen den hohen wissenschaftlichen Nutzen der IR-Spektroskopie.

### Arbeitsteilung in einem Molekül?

Eine interessante Frage betrifft die Selbstständigkeit einzelner Proteinbereiche, eine Strukturänderung auszuführen. Viele Befunde sprechen dafür, dass die Summe über mehrere solcher lokalen Teilprozesse schließlich die Gesamtstruktur des Rhodopsins bestimmt. In diesem Modell wäre der Sehfärbstoff gewissermaßen nicht ein einziger lichtabhängiger Schalter, sondern aus mehreren Teilschaltern zusammengesetzt. In diesem Zusammenhang sind es wieder die evolutionär konservierten Proteinbereiche, die einen Hinweis auf solche funktionellen Domänen geben. Durch die Messung der zeitlichen Veränderung der Proteinstruktur nach „Beschuss“ mit kurzen IR-Blitzen, wie sie am Elektronenbeschleuniger im FZR erzeugt werden können, erhofft man sich an diesem System grundlegende Erkenntnisse zu gewinnen über die Art und Weise, in der Strukturänderungen in Biomolekülen ablaufen. Einzelne Proteinteile lassen sich heute synthetisch herstellen und somit ihre strukturellen Eigenschaften isoliert vom Rest des Proteins studieren. Dies erlaubt eine Analyse der strukturellen Eigenschaften einzelner Molekülbereiche, die eigenständige strukturelle Schaltfunktionen haben könnten. Viele biologische Funktionen beruhen auf solchen meist reversiblen, also in den Ausgangszustand zurückführenden, kurzzeitigen Strukturänderungen von Proteinen. Andere Proteine, die nicht in solche Regelprozesse eingebunden sind, erfüllen ihre Funktion dagegen gerade durch die Starrheit ihrer Struktur. Wie es der Natur gelingt, einerseits flexible Strukturen zu erzeugen, diese aber andererseits nicht zufällig ineinander übergehen zu lassen, sondern gezielt zu Steuerprozessen zu verwenden, ist eine zentrale Frage der Grundlagenforschung in den Lebenswissenschaften. Ihre Beantwortung ist für biotechnologische Anwendungen im Bereich kleinster molekularer Schaltvorgänge ebenso bedeutsam, wie für die Entwicklung von Wirkstoffen, mit denen die biologische Signalleitung in Zellen gezielt beeinflusst werden soll.

## **Die Welt der vernachlässigten Dimensionen >>**

### **Kolloide in der Umwelt - Kolloidgetragener Schadstofftransport**



## Kolloide in der Umwelt - Kolloidgetragener Schadstofftransport

### Was sind Kolloide?

## Die Welt der vernachlässigten Dimensionen

Harald Zänker, Wolfgang Richter, Gudrun Hüttig, Henry Moll,  
Vinzenz Brendler, Siegfried Hübener, Karsten Opel

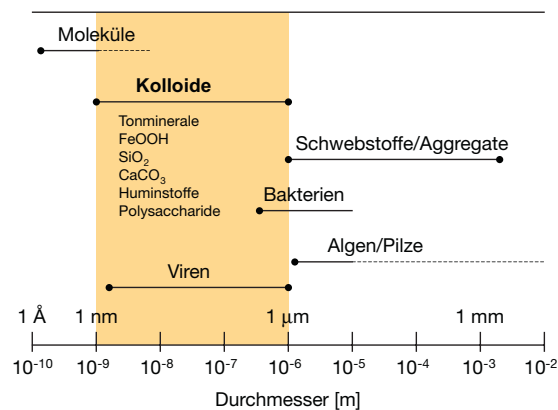
Bewegen sich Spurenschadstoffe (Radionuklide, chemische Gifte) auf dem Wasserpfad durch die Umwelt, so ist die Geschwindigkeit ihres Transports nicht allein von der Hydrologie der Wasserleiter abhängig. Nicht weniger bedeutsam ist die chemische Form, in der ein Schadstoff im Wasser vorliegt, die Speziation des Schadstoffs. Zum Beispiel zeigen Schwermetalle, die als Hydroxide, Carbonate oder Phosphate gebunden sind, meist eine wesentlich geringere Mobilität als echt gelöste ionogene Schwermetalle. Als chemische Formen der mobilen Spurenschwermetalle kommen einfach hydratisierte Ionen, Ionenkomplexe und Neutralkomplexe in Frage. Wie seit längerem diskutiert wird, können beim Transport von Spurenschwermetallen aber auch kolloidale Formen eine Rolle spielen oder sogar dominieren.

Im Physik- und Chemieunterricht lernt man die drei auf der Erde verbreiteten Aggregatzustände der Materie kennen - fest, flüssig und gasförmig. Meist werden zunächst reine Substanzen besprochen, danach behandelt man Lösungen. Lösungen sind homogene Mischungen chemischer Stoffe, die in molekularem Maßstab dispergiert sind. Weitgehend unerkannt blieb bis vor reichlich hundert Jahren das Vorhandensein eines Zwischenstadiums der Materie, welches zwischen makroskopischen Volumenphasen und molekulardispersen Systemen liegt. In diesem Zustand ist eine Komponente in einer anderen fein dispergiert, der Grad der Feinverteilung ist jedoch geringer als der in einfachen molekularen Lösungen. Systeme dieser Art, kolloidale Systeme genannt, haben besondere Eigenschaften (z.B. eine große spezifische Oberfläche), welche ihre Untersuchung schwierig machen und dazu führten, dass ihre Erforschung erst relativ spät begonnen wurde. Der deutsche Physikochemiker Ostwald (1853-1932) nannte die Welt der Kolloide deshalb einmal „die Welt der vernachlässigten Dimensionen“ (eine Welt, deren Dimensionen zwischen den Dimensionen der Atome und Moleküle und denen der makroskopischen Festphasen liegen).

Beispiele für kolloidale Systeme „Feststoff in Flüssigkeit“ sind Milch, Lacke und Farben, Tonschlicker, Latexsuspensionen oder auch Blut. Ein Flüssig-Flüssig-Kolloid ist Mayonnaise. Beispiele makromolekularer Kolloide sind Gelees, Polysaccharidlösungen und Leime. Vom griechischen Wort für Leim rührt auch der Ausdruck „Kolloid“ her. Er wurde 1861 von dem schottischen Chemiker Graham (1805-1869), welcher als der Begründer der Kolloidchemie gilt, geprägt.

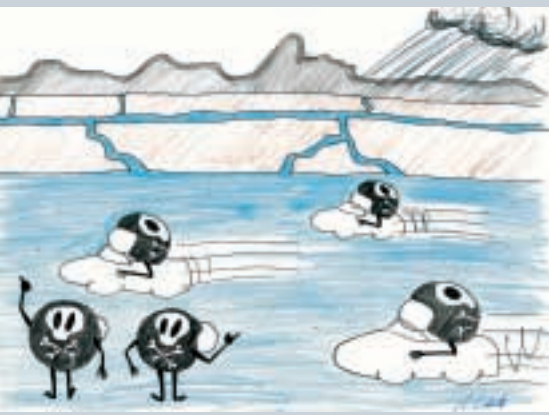
## Kolloide in der Umwelt

**Abb. 1:** Größenspektrum der Partikel in natürlichen Wässern. Der kolloidale Größenbereich liegt zwischen 1 nm und 1  $\mu\text{m}$ .



Eine der auffälligsten Eigenschaften von kolloidalen Lösungen ist, dass sie oft sichtbar trüb oder sogar völlig undurchsichtig sind. Letzteres trifft z.B. auf Milch zu. Sichtbar trübe Kolloide spielen auch in der Umweltforschung eine Rolle. Typischer für Umweltuntersuchungen sind aber kolloidale Lösungen, denen man mit dem bloßen Auge ihren Partikelgehalt nicht oder kaum ansieht. Mancher würde vielleicht zögern, z.B. ein glasklares Grundwasser als eine kolloidale Lösung anzusprechen. Nichtsdestotrotz, empfindlichere Instrumente als das menschliche Auge weisen nach, dass in jedem natürlichen Wasser Partikel kolloidaler Natur enthalten sind. Klare Grundwässer zeigen typischerweise Kolloidpartikelgehalte von 0,01 bis 1 mg/l. Dies entspricht Partikelanzahlkonzentrationen von  $10^{12}$  bis  $10^{14}$  (eine Billion bis hundert Billionen) Partikeln pro Liter.

Analysen des Schadstofftransports durch Grund-, Bergbau- oder Oberflächenwässer sowie Rechenmodelle zur Voraussage dieses Schadstofftransports behandeln die Wasserleiter im Allgemeinen als Zweiphasensysteme, in denen die Schadstoffe zwischen einer mobilen wässrigen Phase und einer immobilen festen Phase (den Gesteins- oder Bodenbestandteilen) verteilt sind. Die Migration (Fortbewegung) vieler Schadstoffe wird dabei durch Adsorption (Anlagerung) am Gestein der festen Phase relativ zur Fortbewegungsgeschwindigkeit des Wassers verzögert. Substanzen mit sehr starker Neigung zur Adsorption an den Wänden z.B. sollten sich in einem Grundwasserleiter nahezu gar nicht vorwärtsbewegen. Es zeigt sich nun aber, dass unter bestimmten Umgebungsbedingungen der Anteil der festen Phase, der im Wasser in suspendierter (fein verteilter) Form als Kolloidpartikel vorliegt, nicht zu vernachlässigen ist. Leicht einzusehen ist, dass die Schadstoffe, die zur Adsorption an Feststoffen neigen, auch an diesen mobilen Partikeln sorbiert werden.



**Abb. 2:** Kolloidgetragener Schadstofftransport in einem Grundwasserleiter nach Szenarium c:

Spurenschadstoffe, die auf Grund ihrer Neigung zur Adsorption an Gesteine eigentlich als immobil betrachtet werden, verbinden sich mit mobilen Kolloidpartikeln.

## Wie man sie aufspürt

Der Einfluss von Kolloiden auf den Transport von Schadstoffen in der aquatischen Umwelt kann ein stimulierender oder ein retardierender sein. Die Konsequenzen der Vernachlässigung der Kolloide unterscheiden sich für die einzelnen Spurenschadstoffe. Folgende Möglichkeiten existieren:

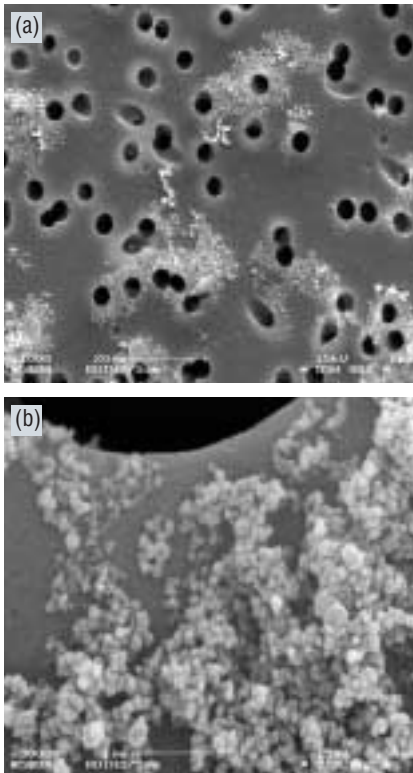
a) Der betrachtete Spurenschadstoff wird nicht an feste Phasen adsorbiert, d. h. er ist „mobil“. Vernachlässigen des kolloidvermittelten Transports ist gerechtfertigt: Die Modellbeschreibung ist korrekt.

b) Der Spurenschadstoff wird im Modell als mobil betrachtet, adsorbiert in Wirklichkeit aber an feste Phasen. Einfang (Scavenging) durch Kolloide und Entfernung durch Ausflockung und Sedimentation (Absetzen) oder durch Kolloidfiltration immobilisieren den Schadstoff, verursachen also eine Art von natürlicher Selbstreinigung („Natural Attenuation“): Die Modellbeschreibung ist „zu pessimistisch“.

c) Der Spurenschadstoff wird im Modell wegen seiner Neigung zur Adsorption an feste Phasen (Gesteinswände) als immobil angesehen. Ein gewisser Anteil seines Inventars wird aber an Kolloidpartikel angelagert und ist deshalb in Wirklichkeit mobil: Die Modellbeschreibung ist „zu optimistisch“.

Der in der Fachliteratur am häufigsten diskutierte Fall ist der Fall c). Er beschreibt eine Art von „Hitchhiking der Schadstoffe“ (siehe Abb. 2). Insbesondere die Forschungsarbeiten zum kolloidgetragenen Schadstofftransport im Umfeld von nuklearen Endlagern orientieren sich an diesem Fall. Die starke Konzentration der wissenschaftlichen Untersuchungen auf Fall c) hat allerdings auch zu einer gewissen Einseitigkeit geführt. Wir möchten helfen, diese Einseitigkeit zu überwinden und wollen die Bedeutung aller drei Fälle für Umweltprognosen herausarbeiten.

Kolloide sind Sensibelchen. In der Regel möchten sie das gar nicht: in feinverteilter Form im Wasser schweben. Die meisten Kolloide sind instabil. Sie möchten eigentlich viel lieber zu einer makroskopischen Phase „koagulieren“ (ausflocken) und sich als solche am Boden absetzen. Und wenn man ihnen genug Zeit gibt, tun sie dies oft auch. „Genug Zeit“ heißt in manchen Fällen einige Sekunden, in anderen Fällen einige Jahrhunderte. Besonders sensibel reagieren Kolloide aber, wenn sie von außen beeinflusst werden. Genau dies geschieht leider, wenn wir sie wissenschaftlich untersuchen (und zwar vom Moment der Probenahme an). Die experimentelle Untersuchung eines materiellen Objekts ist per se eine „Einflussnahme“, ein „in Wechselwirkung treten“. Die Kolloide reagieren darauf; sie verändern sich schlagartig, sie sind auf einmal „nicht mehr die alten“. Bei manchen Untersuchungsmethoden ist dieser Effekt sehr stark, bei manchen ist er nur schwach. Der



**Abb. 3:** Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von Kolloidpartikeln aus dem „Rothschönberger Stolln“ auf einem 5- $\mu\text{m}$ -KernspurfILTER.

(a) Vergrößerung 1 : 1000,

(b) Vergrößerung 1 : 30000.

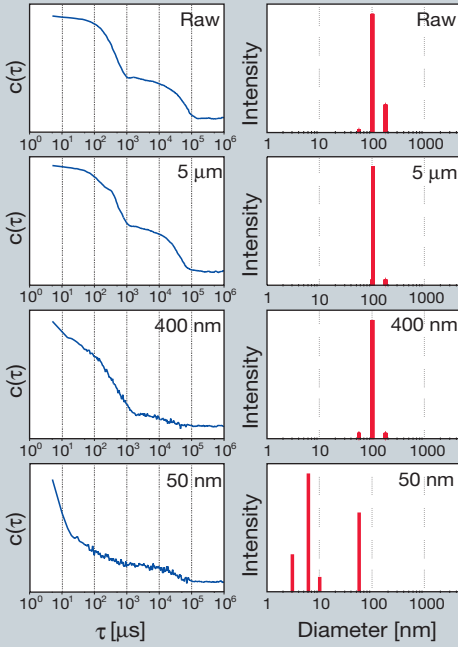
Länge des Maßstabbalkens: 20  $\mu\text{m}$  bzw. 1  $\mu\text{m}$ . Man erkennt die 5  $\mu\text{m}$  großen Filterporen und Kolloide von 100 bis 300 nm Größe. Trotz ihrer Kleinheit werden sehr viele der Partikel vom 5- $\mu\text{m}$ -Filter zurückgehalten.

Experimentator wird, was auch immer er tut, mit der Gefahr von Artefakten (selbst-erzeugten Täuschungen) konfrontiert, er wird von den Kolloiden zunächst „genarrt“. Untersuchungen an kolloidalen Systemen haben deshalb immer etwas von der Lösung eines Kriminalfalls.

Was wir tun ist, uns bei der Untersuchung von Kolloiden nicht auf eine einzelne Messmethode zu verlassen, sondern möglichst viele komplementäre Techniken einzusetzen, die auf möglichst unterschiedlichen physikalischen Messprinzipien beruhen. Dies erhöht die Wahrscheinlichkeit, Artefakte zu erkennen. Uns stehen die in Tab. 1 angegebenen Kolloidmessmethoden zur Verfügung. Sehr artefaktbehaftet ist z. B. die Partikelgrößenbestimmung mittels Filtration. Der Grund: Infolge der Koagulation von kleinen Partikeln über der Filtermembran, der Adsorption von Partikeln an der Filtermembran und vor allem des Verstopfens der Filterporen werden große Mengen an Kolloidpartikeln zurückgehalten, die weit kleiner als die Filterporen sind, Partikel also, die das Filter „eigentlich“ passieren sollten. Filtrationsversuche können deshalb sehr irreführende Informationen über die Partikelgröße liefern. Abb. 3 gibt als Beispiel die Darstellung von Partikeln aus dem Wasser eines Bergwerkstollens auf einem 5-Mikrometer-KernspurfILTER wieder. Man erkennt in der rasterelektronenmikroskopischen Aufnahme die Filterporen sowie Partikel einer vorherrschenden Partikelgröße von 100 bis 300 nm, die meist als größere Aggregate angeordnet sind. Man sieht auch, dass große Mengen an Partikeln am Filter abgeschieden werden, obwohl sie kleiner als die Filterporen sind. Etwas weniger artefaktbehaftet als die Filtration ist die Zentrifugation. Zentrifugationsergebnisse sind aber oft schwer auswertbar. Sehr arm an Wechselwirkungen und Beeinflussungen sind Lichtstremethoden. Da die Streulichtintensität der Kolloidpartikel in extremer Weise (mit bis zur sechsten Potenz) vom Partikelradius abhängt, hat man bei Lichtstremethoden wiederum das Problem, dass sehr kleine Partikel leicht von größeren Partikeln maskiert werden. Hier kann „Demaskieren“ der kleinen Partikel mit Hilfe eines Partikeltrennverfahrens, z. B. der Filtration, helfen. Abb. 4 zeigt, wie durch Filtrationsschritte mit Filtern zunehmend

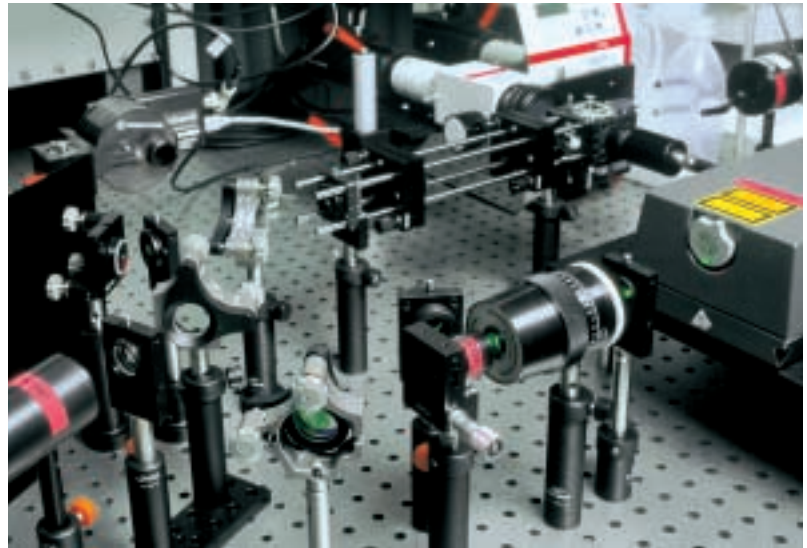
**Tab. 1:** In Rossendorf verfügbare Methoden zur Untersuchung von Umweltkolloiden

Methode	Wirkprinzip	Messgröße	Dimension
Filtration	Größenausschluss	Partikelgröße	nm
Ultrafiltration	Größenausschluss	Partikelgröße	nm
Ultrazentrifugation	Zentrifugalkraft	Partikelgröße	nm
Photonenkorrelations-spektroskopie	Lichtstreuung	Partikelgröße	nm
Feldflussfraktionierung	Hydrodynamik	Partikelgröße	nm
Rasterelektronen-mikroskopie	Scanning mit Elektronenstrahl	Partikelgröße, Partikelform	nm
Transmissionselektronen-mikroskopie	Scanning mit Elektronenstrahl	Partikelgröße, Partikelform	nm
Laser-Doppler-Elektrophorese	Wanderung im elektrischen Feld/Lichtstreuung	Elektrische Ladung der Partikel (Zetapotential)	mV

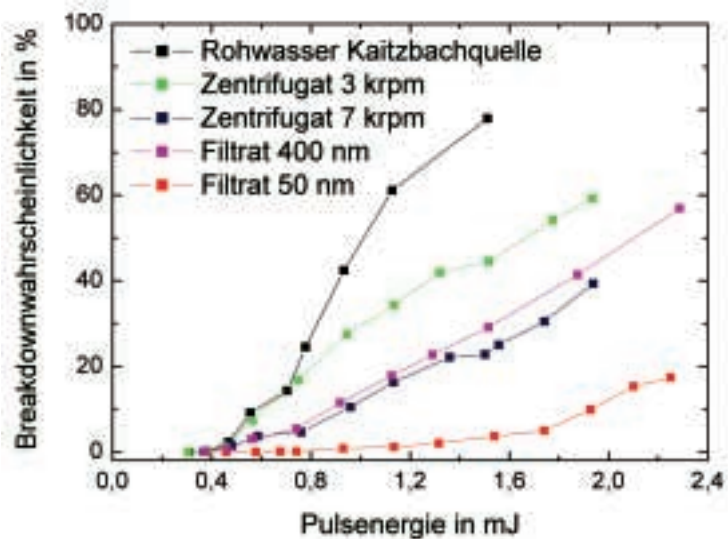


**Abb. 4:** Photonenkorrelationsspektroskopie an einem sauren Bergwerkswasser, kombiniert mit Filtration durch Filter unterschiedlicher Porenweite (Rohprobe, 5  $\mu\text{m}$ , 400 nm, 50 nm) zur Demaskierung kleiner Partikel. Links im Bild die Autokorrelationsfunktionen der Fluktuationen der Streulichtintensität, rechts die resultierenden Partikelgrößenverteilungen. Der Einsatz des 50-nm-Filters führt zur Identifizierung von Partikeln < 10 nm.

**Abb. 5:** Apparatur zur laserinduzierten Breakdown-Detektion (LIBD) aquatischer Kolloide. Ein fokussierter Laserstrahl wird auf eine Messküvette gerichtet und induziert an Partikeln in der Lösung Plasmen. Diese können akustisch und optisch detektiert werden und erlauben Rückschlüsse auf Partikelgröße und Partikelkonzentration.



**Abb. 6:** Vermessung eines kolloidarmen Quellwassers mittels LIBD. Das Messsignal nimmt mit zunehmend schärferen Trennbedingungen ab. Anders als bei alternativen Methoden werden jedoch selbst im 50-nm-Filtrat noch Partikel detektiert.



kleinerer Porengröße aus einem sauren Bergwerkswasser sukzessive größere Submikrometer-Partikel entfernt werden, so dass mit Hilfe der Photonenkorrelationsspektroskopie eine Population von ultrafeinen Partikeln von < 10 nm nachgewiesen werden kann. Eine Grenze der Lichtstromethoden ist, dass ihre Empfindlichkeit nicht für den Nachweis extrem niedriger Konzentrationen kleiner Submikrometer-Partikel ausreicht. Eine Methode, welche auch den Nachweis von sehr kleinen Kolloidpartikeln in Konzentrationen bis hinab zum Bereich von einigen Millionstel Milligramm pro Liter erlaubt, ist die laserinduzierte Breakdown-Detektion (LIBD). Diese Technik wird in Rossendorf seit kurzem eingesetzt. Abb. 5 zeigt die Rossendorfer LIBD-Anlage. Abb. 6 gibt das Ergebnis erster LIBD-Messungen an einem sehr partikelarmen Quellwasser wieder. Es ist zu erkennen, dass das Messsignal (die Breakdownwahrscheinlichkeit) durch Filtrationsschritte mit zunehmend kleinerer Filterporengröße sukzessive abnimmt. Jedoch sind Partikel selbst nach einer Filtration durch ein 50-nm-Filter noch eindeutig nachweisbar, was die im Vergleich zu unseren anderen Methoden weitaus höhere Empfindlichkeit der LIBD belegt.



### Fallbeispiel stillgelegte Erzbergwerke



Abb. 7: Ein Stollen des Uranbergwerks Schlema während der Flutung.  
Foto: bode-Verlag, Kugler

**Besonderheiten von Bergwerken.** Der sächsisch-thüringische Raum war das größte Uranbergbauggebiet Europas. Etwa 60% des in der ehemaligen Sowjetunion verwerteten Urans wurden hier gefördert. Im Jahr 1990 wurde der Uranbergbau in diesem Raum eingestellt. Zurück blieb eine Vielzahl von Altlasten, die sicher verwahrt werden mussten. Halden waren abzudecken, Restlöcher waren mit Abraum aufzufüllen, Gruben waren zu fluten. Abb. 7 gibt einen Eindruck von der Flutung einer Urangrube. Insbesondere die gefluteten Gruben stellen potentielle Schadstoffquellen für Grund- und Oberflächenwasser dar, die noch über längere Zeiträume erhöhte Aufmerksamkeit erfordern. Will man Prognosen über den Austrag von Uran und anderen Schadstoffen aus gefluteten Bergwerken aufstellen, so benötigt man, neben Kenntnissen über die Hydrologie des Bergwerks, Informationen über die Speziation der Schadstoffe. Unser Interesse hier gilt der Frage, ob Uran und andere Schadstoffe in kolloidgetragener chemischer Form auftreten können. Für den Fall nuklearer Endlager ist diese Frage in den vergangenen 30 Jahren sehr intensiv untersucht worden [1,2]. Für den Fall von realen großen Bergwerken fehlten systematische Untersuchungen bisher. Anders als bei nuklearen Endlagern müssen im Falle von gefluteten Bergwerken zwei sehr verschiedene Zeitskalen für den Schadstofftransport in Rechnung gestellt werden [3]. Zunächst gibt es in Bergwerken (wie auch in den nuklearen Endlagern) Zonen einer relativ langsamen Strömung. Dies sind bestimmte Bereiche der Gesteinsmatrix, der eigentlichen Quelle der Schadstoffe. Zum anderen stellen Strecken, Stollen und Schächte eines Bergwerks schnelle, unter Umständen sogar turbulente Verbindungen zur Umwelt dar. Diese Unterschiede in der Transportgeschwindigkeit teilen ein stillgelegtes Bergwerk bei der Transportmodellierung in ein schnellströmendes und ein langsamströmendes Kompartiment. Den zwei Kompartimenten (Bilanzräumen) entsprechen zwei sehr unterschiedliche Wassertypen. Sie stellen die Extremfälle dar, zwischen die alle Bergwerkswässer eingeordnet werden können. Diese sind:

(i) Typ „saurer Porenwasser“. Diese Wässer können durch Zentrifugation vom Gestein abgetrennt oder aus Sickerwasserlachen aufgesammelt werden. Sie entstehen durch die Verwitterungen von sulfidischen Erzen, besitzen hohe Salzkonzentrationen und sind sehr sauer (pH 1-3).

(ii) Typ „Massenwasser“. Dieser Wassertyp entspricht vor allem den fließenden Bergwerkswässern wie den Stollenwässern, die wir zuweilen aus den „Mundlöchern“ alter Bergwerke austreten sehen, und die meist einen pH-Wert in der Nähe des Neutralpunktes besitzen.

Es gibt natürlich Zusammenhänge zwischen den beiden Wassertypen. So ist der Zutritt von saurem Porenwasser zu den Massenwässern der entscheidende Faktor für die Zusammensetzung der Massenwässer. Die Flutung einer Grube kann als die Verdünnung von sauren Porenwässern aufgefasst werden, die zur Bildung von Massenwässern führt. Wichtige kolloidchemische Prozesse werden während dieses Übergangs von Wässern des Typs (i) in Wässern des Typs (ii) beobachtet.

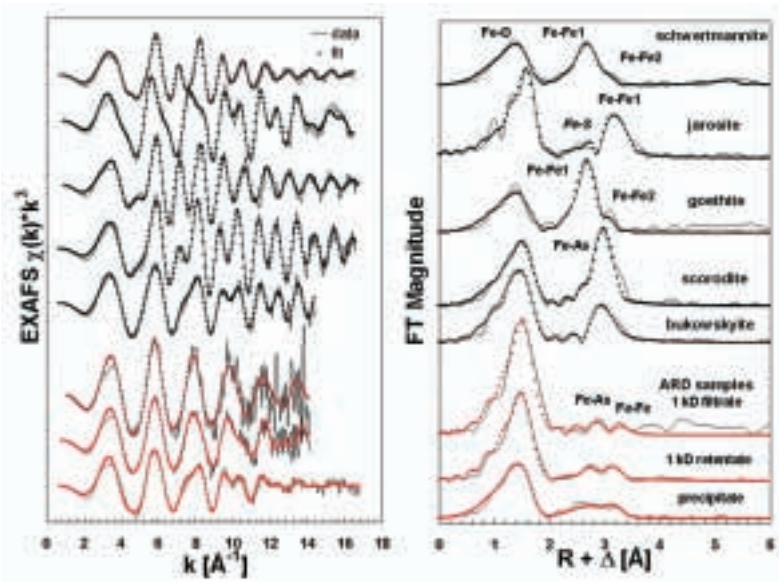
Tab. 2: Chemische Analyse eines sauren Bergwerkswassers aus der „Himmelfahrt Fundgrube“ in Freiberg (pH 2,7)

Komponente	Konzentration [mg/l]
Al	1344
As	471,8
Ca	493
Cd	29,9
Ce	6,45
Cu	96,58
Fe	4588
K	n. n.
Mg	2094
Mn	1247
Na	n. n.
Pb	22,8
Si	70,8
U	1,78
Y	5,6
Zn	4.910
Sulfat	39.500
Carbonat	n. n.
Chlorid	n. n.
O <sub>2</sub>	0,9

n. n. = nicht nachweisbar

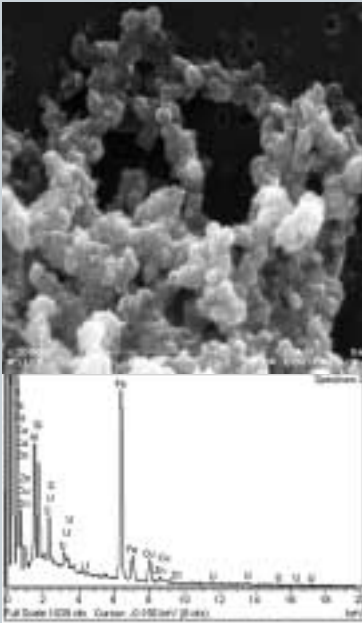
**Kolloide in sauren Porenwässern.** Saure Porenwässer spielen eine Schlüsselrolle bei der Versauerung und Kontamination stillgelegter Bergwerke. Diese gelblichen oder rötlichen „Brühen“, deren Farbe zuweilen entfernt an Roséwein erinnert, werden heute meist als Acid Rock Drainage (ARD) oder Acid Mine Drainage (AMD) bezeichnet. Den sächsischen Bergleuten sind sie seit Jahrhunderten als „Lettenwässer“ bekannt. Die amerikanischen Bergleute gaben diesen sonderbaren Flüssigkeiten den fast schon liebevollen Namen „Yellow Boy“. Acid-Mine-Drainage-Lösungen stellen ein Problem von weltweiter Dimension dar, wie z.B. umfangreiche Schadensberichte von stillgelegten Erz- und Steinkohlegruben in den USA, von Urangruben und Braunkohletagebauen in Deutschland, von Steinkohlegruben in England und Wales und von sehr vielen anderen Bergbaustandorten weltweit beweisen. Zum ersten Mal beschrieben wurden diese Wässer vom Begründer der Mineralogie, dem deutschen Arzt und Humanisten Georgius Agricola (1494-1555) in *De Re Metallica*. Während man die Elementzusammensetzung dieser sauren Wässer gut kennt, bestehen große Kenntnisdefizite bezüglich der Speziation der chemischen Elemente. Als Beispiel für ein solches Wasser des Typs (i) wurde von uns saures Wasser (Lettenwasser) aus der „Himmelfahrt Fundgrube“ in Freiberg untersucht. Seine Zusammensetzung gibt Tab. 2 wieder. Wir fanden in diesem Wasser eine sehr große Anzahl von ultrafeinen Kolloidpartikeln einer Größe unter 10 nm, welche sich durch Photonenkorrelationspektroskopie nach dem Demaskieren der ultrafeinen Partikel mittels Ultrafiltration (Abb. 4) nachweisen ließen. Ihre Konzentration beträgt ca. 1 g/l. Sie bestehen aus Eisen-, Arsen- und Blei-Verbindungen. Über die Frage der Größe und chemischen Zusammensetzung der ultrafeinen Partikel hinaus sind auch die Mineralogie der Partikel und die Bindungszustände toxischer Spurenelemente an den Partikeln von großem Interesse. Die klassische Methode zur mineralogischen Strukturaufklärung, die Röntgendiffraktometrie (XRD), versagt für Partikel des unteren Nanometerbereichs, denn sie ist an die Existenz von Kristallen in der Probe von wenigstens ~1 µm Größe gebunden. Einen Ausweg weist

Abb. 8: Zusammenstellung der EXAFS-Spektren von den Referenzmineralen Schwertmannit, Jarosit, Goethit, Skorodit und Bukowskyit und vom sauren Bergwerkswasser (1-kD-Ultrafiltrat, 1-kD-Ultrafiltrationsretentat, Ausscheidungsprodukt). Aus den Spektren folgt, dass die ultrafeinen Kolloidpartikel aus Schwertmannit und Hydroniumjarosit bestehen.



hier die Extended X-Ray Absorption Fine Structure (EXAFS) Spectroscopy mit Synchrotronstrahlung, welche die Nahordnung von Atomen in der Umgebung des angeregten Elements zu identifizieren vermag und für die wir dank unserer Bestrahlungseinrichtung ROBL am Synchrotron der ESRF in Grenoble exzellente Voraussetzungen haben. Die EXAFS-Spektroskopie ergab, dass die mineralogische Zusammensetzung der ultrafeinen Partikel (die „Kolloidmatrix“) in unserem sauren Wasser ein Gemisch aus den Mineralen Hydroniumjarosit ( $\text{HFe}_3(\text{SO}_4)_2(\text{OH})_6$ ) und Schwertmannit ( $\text{Fe}_8\text{O}_8(\text{OH})_6\text{SO}_4$ ) darstellt. Abb. 8 zeigt EXAFS-Spektren von diesem Wasser und von Referenzsubstanzen. Bei den Versuchen wurde weiterhin beobachtet, dass sich innerhalb von Monaten ein relativ grobes Präzipitat (Ausscheidungsprodukt) aus der kolloidalen Lösung absonderte, ein Vorgang, der auch den Bergleuten bereits seit Jahrhunderten bekannt ist. Wir konnten erstmals eindeutig beweisen, dass ultrafeine Kolloidpartikel ein Zwischenprodukt im Prozess der Bildung des Präzipitats sind. Das Arsen ist der EXAFS-Spektroskopie zufolge als ein Arsenat-Oberflächenkomplex an die ultrafeinen Partikel gebunden, umhüllt diese Partikel also gleichsam. Jedoch wird es bei der Ausscheidung des Langzeitpräzipitats dann zunehmend in das Innere der Hydroniumjarosit- und Schwertmannitstruktur eingebaut. Das Blei scheint in den Kolloidpartikeln als das Mineral Anglesit ( $\text{PbSO}_4$ ) aufzutreten. Das Uran ist in saurem Porenwasser nicht kolloidgetragen. Der Grund dafür ist, dass dieses Element unterhalb eines pH-Wertes von 4 nicht mehr merklich an die Partikel adsorbiert werden kann, da seine Sorptionsaffinität dort rapide abfällt.

**Kolloide in Massenwässern.** Ein völlig andersartiger Wassertyp sind die Massenwässer. Typisches Beispiel ist das Wasser des „Königlich Sächsischen Rothschönberger Stollns“, des Hauptentwässerungsstollens im Freiburger Bergbaurevier, in welchem Teufen von bis zu 700 m erreicht werden. Der Entwässerungsstollen ist 13,5 km lang, er führt ca. 500 Liter Wasser pro Sekunde und mündet in Rothschönberg bei Meißen in die Triebisch, einen kleinen Nebenarm der Elbe. Der pH-Wert dieses Wassers ist 7,2. An toxischen Spurenelementen enthält das Wasser vor allem Arsen, Blei, Cadmium, Zink und Kupfer. Auch Uran ist in geringen Mengen nachweisbar. Durch Zentrifugations-, Filtrations- und Ultrafiltrationsversuche konnten die kolloidgetragenen chemischen Elemente gut von den gelösten unterschieden werden. Die meisten der analysierten chemischen Elemente erwiesen sich als echt gelöst. Andererseits waren nahezu 100% des Eisens, Aluminiums, Arsens und Bleis und immerhin 70% des Kupfers kolloidgetragen. Die Experimente zeigten, dass das Wasser des Rothschönberger Stollns eine Kolloidkonzentration von ca. 1 mg/l aufweist und die vorherrschende Größe der Kolloidpartikel zwischen 100 und 300 nm liegt. Letzteres wurde durch rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen bestätigt (Abb.3). Die Partikel, deren Matrix aus Oxyhydroxiden des Eisen(III) und des Aluminiums besteht, werden offensichtlich in der Mischungszone gebildet, wo sauerstoffarmes, schwach saures Schachtwasser aus der Tiefe sich mit sauerstoffreichem, neutralem Stollenwasser mischt. Auch in diesem Wasser zeigte das Uran „nichtkolloidales“ Verhalten. Hier ist der Grund, dass oberhalb von pH 6 die Adsorption von Uran an Kolloide durch die Bildung von wasserlöslichen Uranylcarbonatkomplexen, welche nicht adsorbieren, verhindert wird.



**Abb. 9:** Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme und energiedispersive Röntgenmikroanalyse von Kolloidpartikeln aus Flutungswasser des Uranbergwerks Königstein auf einem 100-nm-Filter. Vergrößerung 1:30 000, Länge des Maßstabbalkens 1  $\mu\text{m}$ . Man erkennt die 100 nm großen Filterporen (rechts oben) und Kolloide von 100 bis 300 nm Größe. Die Analyse verrät neben der Anwesenheit von Fe, Zn, Cu usw. auch das Vorhandensein von Uran in den Kolloiden.

**Kolloide in Flutungswässern.** Flutungswässer stellen, wie erwähnt, den Übergang zwischen sauren Porenwässern und Massenwässern dar. Als Beispiel sollen unsere Untersuchungen an Flutungswasser aus dem Uranbergwerk Königstein vorgestellt werden. Der pH-Wert dieses Wassers war 5,6, das Wasser war sauerstoffarm, das Eisen in diesem Wasser war zum größten Teil zweiwertig. Das Eisen ist der wichtigste Kolloidbildner; der wichtigste Kolloidbildungsmechanismus ist die Oxidation und Hydrolyse des Eisens durch den Eintrag von Sauerstoff und den pH-Anstieg beim Fluten des Bergwerks. Zentrifugationsversuche zeigten, dass die Kolloidmatrix aus Eisen(III)-verbindungen und einer kleineren Menge an Aluminiumverbindungen besteht. Sie offenbarten auch die Anwesenheit von Spurenkomponenten wie Kupfer, Arsen und Seltenerdmetallen in den Kolloiden, vor allem aber die Anwesenheit von Uran. Aus rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen erkennt man eine vorherrschende Kolloidpartikelgröße von 100 bis 300 nm, und Elementanalysen an den Partikeln bestätigen die Anwesenheit von erheblichen Uranmengen (Abb. 9). Die Untersuchungen machten deutlich, dass die Anteile der an den Kolloiden adsorbierten Spurenmetalle sehr stark von den wasserchemischen Bedingungen, insbesondere vom pH-Wert abhängen. So kann z. B. der kolloidgetragene Anteil des Urans durch Verändern des pH-Wertes um nur eine pH-Einheit von 0% auf nahezu 100% verschoben werden, ein Phänomen, welches die Vorhersage des Kolloid-Verhaltens von Uran in einem System von der Dimension eines großen stillgelegten Uranbergwerks erheblich erschwert. Die Bestimmung des Zetapotentials (der elektrischen Ladung) der Kolloidpartikel mit Hilfe der Laser-Doppler-Elektrophorese ergab einen Wert von nur  $-7,5$  Millivolt. Eine so geringe Ladung bedeutet, dass eine geringe elektrostatische Stabilisierung der Kolloide (durch gegenseitige Abstoßung) vorliegt. Bei den Versuchen wurde wegen dieser geringen Stabilisierung eine deutliche Neigung der Partikel zur Aggregation (Flockung) und Sedimentation (Absetzen) beobachtet. Dies ist eine Eigenschaft, die auch für das Verhalten der Kolloide im Bergwerk von größter Bedeutung ist.

**Konsequenzen für die Umwelt.** Die Frage der praktischen Konsequenzen, die aus dem Kolloidverhalten für das Verhalten von toxischen Spurenelementen in stillgelegten Bergwerken folgen, muss, wie eingangs erwähnt, für jedes chemische Element individuell beantwortet werden. So geht man für das sechswertige Uran (Uranyl) in sauerstoffhaltigen Wässern gemeinhin davon aus, dass es echt gelöst und nicht kolloidgetragen vorliegt, also dem eingangs beschriebenen Fall a) folge, dass es also uneingeschränkt mobil sein müsste. Unsere Untersuchungen an realen Bergwerkswässern zeigen aber, dass das sechswertige Uran in einem bestimmten pH-Bereich (pH 4 bis 6) zu großen Teilen in kolloidgetragener Form auftritt. Dieser pH-Bereich muss nun aber bei jeder Bergwerksflutung „durchfahren“ werden, denn die Wässer entwickeln sich stets von den sauren Porenwässern (pH < 3) zu den Massenwässern (pH  $\approx$  7). Kolloidpartikel können in Flutungswässern also als Einfänger (Scavenger) für sechswertiges Uran wirken. Wichtig ist weiterhin, dass die Kolloidpartikel in einem bestimmten pH-Bereich zur Aggregation neigen. Die Anlagerung der Uranylionen an Kolloidpartikel durch Adsorption und die Tendenz der Partikel zu Ausflockung und Sedimentation führen dazu, dass die Kolloide in einem bestimmten pH-Bereich eine immobilisierende Wirkung auf das Uran ausüben, sie also eine Form von „Natural Attenuation“ bewirken (Fall b, siehe vorn). Anders als beim

Uran(VI) liegen die Verhältnisse bei den toxischen Spurenelementen Arsen, Blei und Kupfer. Diese Elemente werden gewöhnlich als immobil in Bergwerkswässern angesehen, weil sie zur Abscheidung an den Felswänden neigen. Hier verursacht der Mechanismus eines kolloidgetragenen Transports eine potentielle Mobilität von „eigentlich immobil“ Elementen (Fall c, siehe vorn). Auch das vierwertige Uran, welches in sauerstoffarmen Bergwerkswässern auftritt und für Uranbergwerke von großem Interesse ist, muss in diese Gruppe von chemischen Spezies eingeordnet werden.

**Nutzung der Ergebnisse.** Mit den erzielten Ergebnissen wurden wichtige Beiträge für die Entwicklung künftiger Modelle zur Beschreibung des kolloidgetragenen Schadstofftransports in stillgelegten Bergwerken geschaffen. Solche Modelle können einer verbesserten Abschätzung der von Altbergwerken ausgehenden Risiken dienen und die Entwicklung von Methoden zur Risikobegrenzung unterstützen.

## Pläne

Bei uns in Rossendorf wird die Welt der vernachlässigten Dimensionen nicht vernachlässigt!

In unserem Fallbeispiel wurde der Einfluss von eisenhaltigen Kolloiden auf das Verhalten von sechswertigem Uran demonstriert. Da das System „eisenhaltige Kolloide - Uran(VI)“ für Szenarien in vielen geologischen Umgebungen (Bergwerke, nukleare Endlager) von großer Bedeutung ist, prüfen wir zur Zeit, in welcher Form genau das sechswertige Uran an eisenhaltige Kolloide gebunden wird und, daran anschließend, was langfristig das weitere Schicksal des kolloidgetragenen U(VI) nach einer eventuellen Freisetzung in die Natur ist. Dies versuchen wir vor allem mit der EXAFS-Spektroskopie mit Hilfe unserer Bestrahlungseinrichtung ROBL an Kolloidpartikeln, welche aus realen Bergwerkswässern gewonnen wurden. Des Weiteren haben wir mit Experimenten zur Identifizierung von kolloidgetragenen Formen des Urans in vierwertiger Form unter den Bedingungen von sauerstoffarmen Wässern begonnen, welche ebenfalls sowohl für stillgelegte Uranbergwerke als auch für nukleare Endlager bedeutsam sind. Da für sauerstoffarme Lösungen zum Teil sehr niedrige Kolloidkonzentrationen erwartet werden, möchten wir hier, neben den bei uns schon etablierten Methoden, vor allem die neu aufgebaute LIBD nutzen. Außerdem wollen wir künftig das am Beispiel von Uran erworbene Know-how für die Charakterisierung von kolloidgetragenen Formen der Actiniden Plutonium, Neptunium und Americium nutzen, die für nukleare Endlager von großer Bedeutung sind. Ziel ist dabei die Untersuchung der Löslichkeit der Actiniden, der Bildung von Actiniden-Eigenkolloiden und der Anlagerung von Actiniden an bereits vorhandene nichtradioaktive Trägerkolloide wie zum Beispiel Eisenhydroxid- oder Huminstoffkolloide. Der kolloidgetragene Transport von Actiniden und anderen Schadstoffen stellt in der Umweltforschung ein nach wie vor zu wenig aufgeklärtes Phänomen dar. Wir möchten bei der Aufhellung dieser „Grauzone“ nach Kräften helfen.

## Literatur:

- [1] J.F. McCarthy, J.M. Zachara, Subsurface transport of contaminants. Environmental Science and Technology 23 (1989), S. 496-502.
- [2] J.I. Kim, Actinide Colloids in Natural Aquifer Systems. MRS Bulletin, Dez. 1994, S. 47-53.
- [3] H.S. Viswanathan, M. Sauter, Contaminant migration from underground mines using a coupled continuum pipe-flow model. Proc. of the 10th Internat. Symp. on Water-Rock Interaction (ed. R. Cidu), Villasimius, Italy, 10. - 15 July 2001. A.A. Balkema Publishers, Lisse (2001), S.1285

## **Proteinoxidation und Krankheit >>**



## Proteinoxidation und Krankheit

Jens Pietzsch, Ralf Bergmann, Frank Wüst und Jörg van den Hoff

*Oxygen, the breath of life or oxygen, the first toxic oxidizing air pollutant?!*

*Barry Halliwell, 1984*

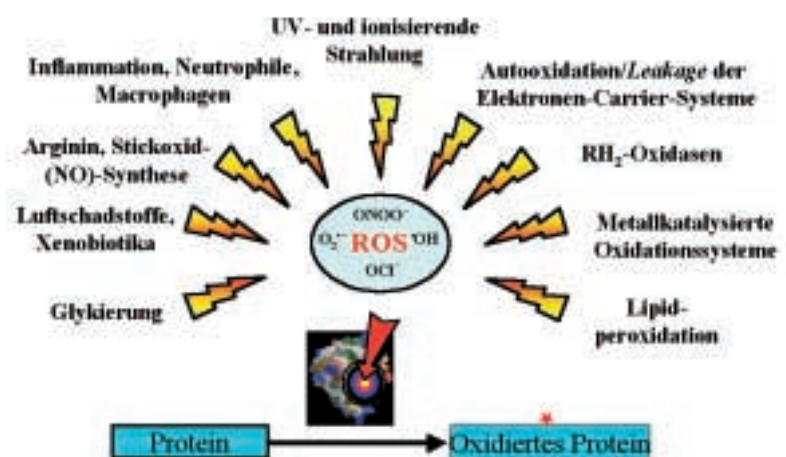
Freie Radikale sind Atome oder Moleküle, die ein oder mehrere ungepaarte Elektronen besitzen. Durch die einsamen Elektronen sind freie Radikale hochgradig reaktiv. Sie sind stets auf Raubzug und bestrebt, anderen Molekülen ein Elektron wegzunehmen, sie also chemisch zu oxidieren, um eine stabilere Elektronenanordnung zu erhalten. Diese Reaktionsfreudigkeit lässt sich dabei direkt an der Halbwertszeit des Radikals ablesen. Je kleiner diese ist, desto reaktionsfreudiger ist das Radikal. Die Halbwertszeit freier Radikale reicht von mitunter nur Millionstel Sekunden bis zu einigen wenigen Sekunden. Sauerstoffradikalen, die definitionsgemäß Radikale des Sauerstoffs darstellen, gilt ein besonderes Interesse, da sie im menschlichen Körper ganz natürlich während der Energiegewinnung, aber auch durch krankheitsbedingte oder äußere Einflüsse entstehen. Bei diesen Vorgängen entstehen auch andere aggressive Sauerstoffverbindungen, die strenggenommen keine freien Radikale sind. Man spricht deshalb ganz allgemein von reaktiven Sauerstoffspezies (reactive oxygen species, ROS). Jede der rund 60 Billionen Körperzellen wird täglich mit etwa 10.000 Angriffen durch ROS konfrontiert. In den Zellen sind neben Fetten (Lipiden) und Nukleinsäuren besonders Eiweißmoleküle (Proteine) empfindlich gegenüber dem Angriff von ROS. Die Oxidation von Proteinen kann zur Veränderung ihrer Struktur und zur Beeinträchtigung ihrer biologischen Funktion führen. Sie sind nicht mehr verwertbar und schwimmen als „Sondermüll“ in der Zelle herum. Solche Veränderungen sind beim Menschen eng mit der Ursache, der Ausprägung und dem Fortschreiten verschiedener Krankheiten assoziiert. Durch neue Methoden zur Charakterisierung und quantitativen Beschreibung der Bildung und des Stoffwechsels (Metabolismus) spezifischer Oxidationsprodukte werden Hinweise auf die Art und Weise der Schädigung sowie die Schutzmöglichkeiten des Organismus gewonnen.



## Entstehung reaktiver Sauerstoffspezies

ROS entstehen im menschlichen Organismus bei einer Vielzahl physiologischer und pathophysiologischer Vorgänge. So werden bei der zur Energiegewinnung der Zelle erforderlichen Aktivierung von Sauerstoff in den Mitochondrien, bei Entzündungsreaktionen (besonders bei der Abwehr von Bakterien und Viren durch das Immunsystem), beim Einwirken ultravioletter Strahlung (beim Sonnenbaden) bzw. ionisierender Strahlung (bei Langstreckenflügen) oder dem Metabolismus verschiedener Schadstoffe (Umweltgifte, Drogen, Alkohol, Rauchen und Medikamente) reaktive Sauerstoffspezies gebildet. Dazu zählen das Hydroxylradikal ( $\text{O}^*\text{H}$ ), das Wasserstoffperoxid ( $\text{H}_2\text{O}_2$ ), das Superoxidradikalanion ( $\text{O}_2^{\cdot-}$ ), die unterchlorige Säure ( $\text{HOCl}$ ) oder das Oxynitritanion ( $\text{ONOO}^-$ ; Abb. 1). Dabei ist das Hydroxylradikal mit einer Halbwertszeit von  $10^{-9}$  Sekunden der aggressivste Angreifer. Die Bildung der ROS wird durch ein antioxidatives Schutzsystem streng kontrolliert. Wichtige Bestandteile der antioxidativen Schutztruppe des Menschen sind Enzyme, besonders die Superoxiddismutase, Katalase und Glutathion-Peroxidase, niedermolekulare körpereigene (Harnsäure, Bilirubin und Glutathion) sowie von außen zugeführte Antioxidantien ( $\alpha$ -Tocopherol, L-Ascorbinsäure und  $\beta$ -Carotin). Übersteigt die Bildungsrate der ROS die Kapazität dieses Schutzsystems, kommt es zum oxidativen Stress.

Abb. 1: Oxidative Modifikation von Proteinen - Bildung reaktiver Sauerstoffspezies (ROS) im menschlichen Organismus



## Biologische Wirkung reaktiver Sauerstoffspezies

Tab. 1: Erkrankungen des Menschen, die mit erhöhten Konzentrationen an oxidierten Proteinen assoziiert sind

Amyotrophe Lateralsklerose
Atherosklerose
Cystische Fibrose
Essentielle Hypertonie
Morbus Alzheimer
Morbus Parkinson
Hutchinson-Gilford Syndrom (Progeria infantilis)
Osteoarthritis
Rheumatoide Arthritis
Schocklunge (adult (acute) respiratory distress syndrome)
Diabetes mellitus Typ 1
Diabetes mellitus Typ 2
Ulzerative Colitis
Werner-Syndrom (Progeria adultorum)

## Oxidierter Lipoproteine und Atherosklerose

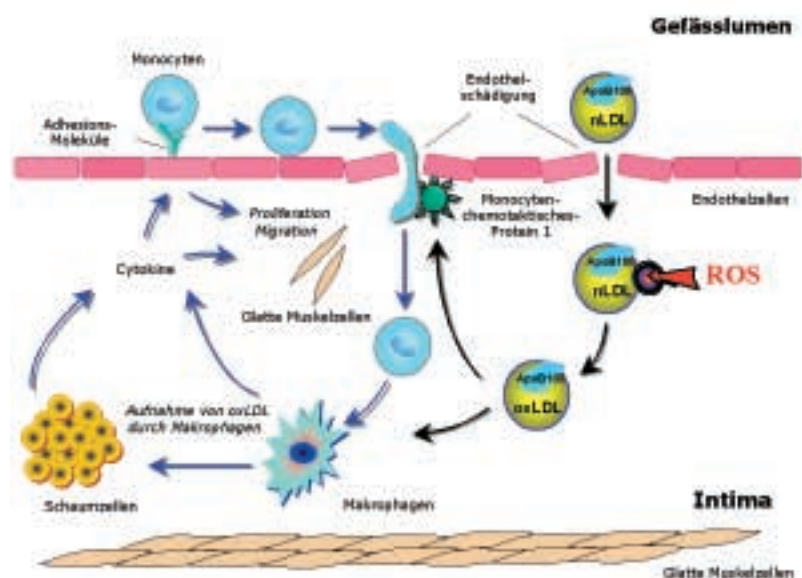
Im menschlichen Organismus können ROS zur Zerstörung zellulärer Strukturen oder zur Modifikation von Molekülen der zellulären Mikroumgebung führen. Dabei sind neben ungesättigten Fettsäuren und Lipiden insbesondere intra- und extrazelluläre Proteine Ziele eines direkten oxidativen Angriffs. Mögliche Konsequenzen sind dabei die Inaktivierung von Enzymen, Veränderungen von Antigen- und Rezeptor-Ligand-Eigenschaften, die Aktivierung spezieller Abbaumechanismen oder die Inhibierung von Transportprozessen. Darüber hinaus resultieren aus der Proteinoxidation schwerwiegende Eingriffe in die Regulation der Genexpression und der Zelldifferenzierung sowie die strukturelle Integrität von Zellorganellen, Zellen und Geweben. Diese Veränderungen sind eng mit der Krankheitsursache und dem Ausmaß verschiedener neurodegenerativer Stoffwechsel- und Autoimmunerkrankungen assoziiert (Tab. 1). Trotz gravierender Unterschiede im klinischen Erscheinungsbild und im Verlauf der einzelnen Erkrankungen gibt es eine Reihe von Gemeinsamkeiten auf zellbiologischer und pathobiochemischer Ebene, die direkt auf die ROS-vermittelte Proteinmodifikation zurückzuführen sind [1].

So kommt beispielsweise der Oxidation des Apolipoprotein B-100 (ApoB-100), dem wichtigsten Proteinanteil der Lipoproteine geringer Dichte (low density lipoproteins, LDL), eine Schlüsselrolle im Pathogenesekonzept der Atherosklerose zu. Die Atherosklerose (*griech.: atheroma*, Grützbeutel; *sklero*, hart) ist eine chronische Erkrankung, die morphologisch durch die lokale Ausbildung von Verletzungen und Verhärtungen (Plaques) sowie eine generalisierte Vergrößerung der arteriellen Gefäßwand gekennzeichnet ist. Der Prozess der Atherogenese beginnt bereits im frühesten Kindesalter und verläuft oftmals unbemerkt über Jahre bis Jahrzehnte. Davon betroffen sind vor allem die Gefäße des Herzkreislaufs, die Hauptschlagader, die hirnersorgenden Gefäße, die Gefäße der unteren Extremitäten und die Nierengefäße. Die fortschreitende, häufig schubweise Entwicklung der pathologischen Umbauvorgänge der Gefäßwand beginnt an den Endothelzellen. Diese kleiden in einschichtiger Lage das Lumen der Blutgefäße aus. Bald darauf sind auch die mittleren muskulären und äußeren Bindegewebsschichten der Gefäßwand betroffen. Zu einer kritischen Einengung des Gefäßlumens und zu einem eingeschränkten Blutfluss, die sich klinisch z.B. als Angina pectoris, periphere Durchblutungsstörung oder Nierenversagen manifestieren, kommt es aber meist erst in der zweiten Lebenshälfte. Eingeleitet und begünstigt wird die Atherogenese durch ein breites Spektrum von Risikofaktoren, darunter Fettstoffwechselstörungen sowie Bluthochdruck, Blutzuckererhöhung (Diabetes mellitus), Adipositas und Rauchen, deren Bedeutung in zahlreichen, z.T. prospektiv angelegten klinisch-epidemiologischen Studien gesichert werden konnte. Die Gesamtheit der molekularen und zellulären Ursachen und Mechanismen der Atherosklerose ist aber nur

unvollständig aufgeklärt. In der Vergangenheit betonten die im Ansatz sehr verschiedenen, häufig konkurrierenden Hypothesen der Atheroskleroseentstehung die herausragende Bedeutung einzelner Risikofaktoren bzw. -konstellationen, wie z.B. die *Lipidhypothese*, die Cholesterolkonzentration im Blut oder die „*Response to injury*“-Hypothese, eine primäre Verletzung der Gefäßwand. Aus heutiger Sicht, und hier setzen auch die Untersuchungen unserer Arbeitsgruppe an, lassen sich zwei Kernpunkte dieser frühen Hypothesen - modifizierte, cholesterolreiche Lipoproteine und lokale zelluläre Reaktion - mit den übrigen bekannten Risikofaktoren in einem neuen Konzept der multifaktoriellen Krankheitsursache der Atherosklerose vereinigen.

Mittlerweile gilt als gesichert, dass die Bildung oxidativ veränderter LDL auch direkt durch Kontakt der LDL mit Gefäßwandzellen initiiert werden kann. Insbesondere der Kontakt von LDL mit Endothelzellen und gewebsständigen Makrophagen setzt frühe Modifikationsreaktionen in Gang. Die oxidierten LDL verlieren ihre Bindungsaffinität zum LDL-Rezeptor. *Vice versa* werden oxidierte LDL von „Fresszellen“ des Immunsystems (Makrophagen) über LDL-Rezeptor-unabhängige Abbauewege exzessiv aufgenommen. Dabei werden die Makrophagen zu sogenannten Schaumzellen umgewandelt (Abb. 2). Dieser Prozess löst ein chronisches Entzündungsgeschehen aus, das auf andere Zellpopulationen der Gefäßwand (Endothelzellen, glatte Muskelzellen) übergreift. Die Akkumulation von Schaumzellen, eine fortschreitende Zellproliferation sowie die verstärkte Bildung von extrazellulärer Matrix und  $\text{Ca}^{2+}$ -Lipidkomplexen initiiert die oben genannten atherosklerotischen Umbauvorgänge der arteriellen Gefäßwand [2-3].

**Abb. 2:** Pathogenese der Atherosklerose: Chronische Endothelschädigung und Influx, Akkumulation und metabolisches Schicksal oxidativ modifizierter Lipoproteine geringer Dichte (LDL)



## Nachweis von Produkten der Proteinoxidation

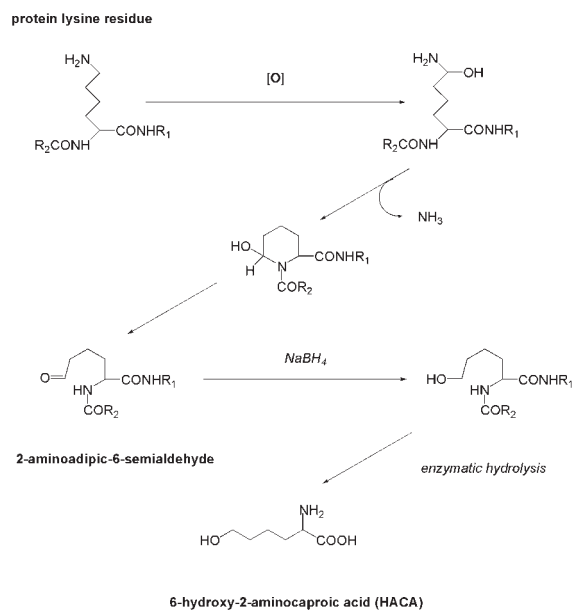
Tab. 2: Häufige Produkte der direkten oxidativen Modifikation von Aminosäure-Seitenketten

Arginin	→ $\gamma$ -Glutamylsemialdehyd*
Cystein	→ Cystin
Glycin	→ Aminomalonsäure
Histidin	→ 4-Hydroxyglutaminsäure
Leucin	→ 4-Hydroxy-leucin
Lysin	→ $\alpha$ -Amino adipylsemialdehyd*
Methionin	→ Methioninsulfoxid
Phenylalanin	→ <i>o</i> -, <i>m</i> -Tyrosin
Prolin	→ 3-Hydroxyprolin, $\gamma$ -Glutamylsemialdehyd*
Tryptophan	→ N-Formylkynurenin, 3-Hydroxykynurenin, Kynurenin
Tyrosin	→ 3-Chlorotyrosin, 3,5-Dichlorotyrosin, 3-Nitrotyrosin, Dityrosin
Valin	→ 3-Hydroxyvalin, 4-Hydroxyvalin

\*Diese Produkte werden auch bei der Bestimmung von Proteincarboxylen erfaßt.

Die meisten Parameter und Methoden, die für eine Charakterisierung bzw. Bestimmung des Ausmaßes des oxidativen Stresses genutzt werden, sind z.T. unspezifisch (Protein-carbonyle), oft nur für experimentelle Modellsysteme geeignet (Elektronenspin-Resonanz-Spektroskopie, Spin-trapping-Verfahren) oder aber durch eine extrem kurze Halbwertszeit der Produkte der Lipidoxidation gekennzeichnet. Im Gegensatz dazu können durch die Analyse von spezifischen Produkten der Proteinoxidation, beispielsweise 4-Hydroxy-nonenal-modifizierte Lysinreste sowie direkt oxidierte Aminosäure-Seitenketten, Hinweise auf die Art der initial schädigenden ROS, auf Reaktionsverläufe sowie die Abwehr- und Reparaturmöglichkeiten des Organismus gewonnen werden. Oxidativ modifizierte Proteine haben oftmals relativ lange Halbwertszeiten (Stunden bis Tage). Die Oxidationsprodukte selbst sind *in vivo* meist sehr stabil. Die Tabelle 2 zeigt eine Auswahl von häufigen Produkten der direkten oxidativen Modifikation von Aminosäure-Seitenketten, die im Rahmen experimenteller und klinischer Untersuchungen identifiziert und quantifiziert wurden [4].

Für diese Untersuchungen werden hauptsächlich Proteine aus Blutzellen, dem Blutplasma oder anderen leicht zugänglichen Geweben (Gelenkflüssigkeit, Liquor) genutzt. Dazu zählen das schon erwähnte ApoB-100 aus dem Plasma, Gesamt-Membranproteine oder Glucose-6-phosphat-Dehydrogenase aus roten Blutkörperchen (Erythrozyten), Serumalbumin,  $\alpha_1$ -Antiproteinase aus Kniegelenkspunktaten sowie Surfactant-Proteine. Für die Präanalytik ist die Isolierung einer hinreichend großen Menge des betreffenden Proteins, eine schonende Reinigung und die anschließende Hydrolyse von besonderer Bedeutung. Zur Verhinderung der Bildung unabsichtlich herbeigeführter Veränderungen durch Oxidationsprozesse unmittelbar nach der Entnahme der Probe aus dem Organismus sind diese Arbeiten unter Ausschluss von Sauerstoff (z.B. durch Einsatz von Argon) oder unter strikt reduzierenden Bedingungen (z.B. durch den Einsatz von Butylhydroxytoluol (BHT) bzw. NaBH<sub>4</sub>) durchzuführen. Der Einsatz von geeigneten Reduktionsmitteln in einer frühen Phase der Probenvorbereitung gestattet auch die Stabilisierung empfindlicherer Oxidationsprodukte. Durch unsere Arbeitsgruppe wurden beispielsweise neue Verfahren entwickelt, bei welchen die metastabilen Metaboliten  $\gamma$ -Glutamylsemialdehyd, ein Oxidationsprodukt von Prolin- und Argininresten, und  $\alpha$ -Amino adipylsemialdehyd, ein Oxidationsprodukt von Lysinresten, mittels NaBH<sub>4</sub> zu 5-Hydroxy-2-amino-valeriansäure (HAVA) bzw. 6-Hydroxy-2-amino-capronsäure (HACA) reduziert werden (Abb. 3). Die dabei entstehenden, nicht-proteinogenen Aminosäuren erweisen sich im Bezug auf die weitere Bearbeitung der Probe und die Analyse als außerordentlich stabil [5-6].



**Abb. 3:** Mechanismen der Oxidation von Prolin- und Arginin-Seitenketten zu  $\gamma$ -Glutamylsemialdehyd (links) und von Lysin-Seitenketten zu  $\alpha$ -Amino adipylsemialdehyd (rechts) und deren nachfolgende Reduktion zu 5-Hydroxy-2-aminovaleriansäure (HAVA) bzw. 6-Hydroxy-2-amino-capronsäure (HACA).  $NHR^1$  und  $R^2$  bezeichnen die flankierenden Aminosäure-Reste innerhalb der Polypeptidkette [5-6].

Die Hydrolyse der Proteine wird enzymatisch durchgeführt, da einige der Oxidationsprodukte unter stark sauren und basischen Bedingungen bzw. bei hohen Temperaturen zerstört werden. Die Identifizierung und Quantifizierung der Oxidationsprodukte aus den gewonnenen Proteinhydrolysaten erfolgt mittels Gaschromatographie-Massenspektrometrie (GC-MS) [4-6]. Mit diesen Indikatoren gelang unserer Arbeitsgruppe erstmals der in vivo-Nachweis der direkten Modifikation von Prolin- und Argininresten des LDL ApoB-100 bei Patienten mit primären Fettstoffwechselstörungen und frühzeitigen kardiovaskulären Erkrankungen [7]. Darüber hinaus konnte der Nachweis von oxidierten LDL in atherosklerotischem Plaquematerial beim Menschen sicher belegt werden [8-9]. Neben der hohen Sensitivität und Spezifität der angewandten Methoden besteht ein großer Vorteil darin, dass die Analyse der Elternsubstanzen (native Aminosäuren) oder mehrerer Oxidationsprodukte in einem Protein gleichzeitig erfolgen kann. Die aktuellen Weiterentwicklungen im Bereich der Massenspektrometrie (z.B. *matrix-assisted laser desorption-ionisierung*, MALDI) und der Kopplungstechniken (LC-MS) gestatten darüber hinaus bereits die Messung derartiger Oxidationsprodukte in komplexeren Matrices sowie an größeren Proteinfragmenten (z.B. nach partieller Hydrolyse mit Trypsin) bzw. sogar am intakten Protein [10]. Damit lassen sich auch proteindomänen-spezifische Oxidationsprozesse genau verfolgen. Die Einsatzmöglichkeiten dieser Verfahren bei klinischen sowie pharmakologischen und toxikologischen Fragestellungen schließen darüber hinaus die Bestimmung biologisch relevanter ROS-Dosen ein und erlauben in begrenztem Umfang auch eine Expositionskontrolle und Risikoabschätzung. So beträgt z.B. die Lebensdauer der Erythrozyten beim Menschen etwa 120 Tage, wodurch die Kontrolle einer Exposition gegenüber oxidativem Stress über die zurückliegenden 3 Monate möglich wird. Die gemessenen Produktkonzentrationen stellen dabei ein Maß für die individuelle Beanspruchung dar.

## Untersuchungen mittels Positronen-Emissions-Tomographie

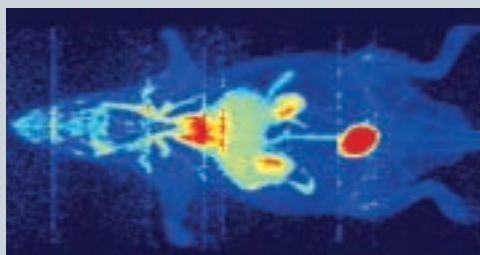


Abb. 4: In vivo-Bioverteilung von  $[^{18}\text{F}]$ -fluorbenzoylierten nativen LDL bei einer männlichen Wistar-Ratte 60 Minuten nach intravenöser Applikation des Radiotracers [11]

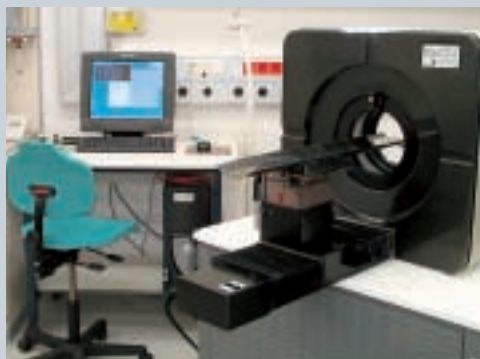


Abb. 5: Positronen-Emissions-Tomograph für kleine Versuchstiere (microPET P4) am Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie

## Ausblick

Von großem Interesse sind in diesem Zusammenhang auch Untersuchungen zum metabolischen Schicksal der oxidierten Proteine bzw. Lipoproteine im lebenden Organismus. Der von uns gewählte attraktive Lösungsansatz besteht in der Markierung nativer und oxidierter Proteine und Lipoproteine mit kurzlebigen Positronenstrahlern, beispielsweise mit Fluor-18  $[^{18}\text{F}]$ . Dieses Label wird über eine Reaktion primärer Aminogruppen des N-Terminus und vorhandener Lysinseitenketten des Zielproteins mit N-Succinimidyl-4- $[^{18}\text{F}]$ -fluorbenzoesäure eingeführt. Erste Ergebnisse zeigen, dass diese Markierungsreaktion zu  $[^{18}\text{F}]$ -fluorbenzoylierten Proteinen bzw. Lipoproteinen führt, die sich nicht von den nativen Verbindungen unterscheiden [11]. Das lässt ihre Untersuchung unter Bedingungen zu, bei denen das physiologische Gleichgewicht des Organismus nicht beeinflusst wird. Die so markierten Verbindungen erlauben eine detaillierte radiopharmakologische Charakterisierung mit Hilfe der Positronen-Emissions-Tomographie (Abb. 4).

In den letzten 10-15 Jahren hat sich die PET zu einer wichtigen Methode in der Grundlagenforschung wie auch in der klinischen Routine entwickelt, die darüber hinaus auch wichtige Beiträge auf dem Gebiet der Arznei- und Lebensmittelforschung liefert. Von großer Bedeutung für die geplanten Fragestellungen sind die in neuester Zeit verfügbar gewordenen dedizierten Geräte sehr hoher Auflösung (1-2 mm), welche quantitative (dynamische) PET-Messungen am Tiermodell (kleine Versuchstiere) ermöglichen. Am Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie wird dazu ein microPET P4 (Concorde, Knoxville, TN; Abb. 5) eingesetzt.

Die der PET-Methodik inhärente Fähigkeit zur Quantifizierung von regionalen Transportprozessen *in vivo* wird in den laufenden Untersuchungen unserer Arbeitsgruppe benutzt, um zu einer quantitativen Modellierung der oben beschriebenen Prozesse im Tiermodell zu gelangen. Diese Untersuchungen erlauben auf Organebene auch Vorhersagen hinsichtlich der Auswirkung von beispielsweise Gendefekten, Stoffwechselerkrankungen und von medikamentösen Interventionen auf die Proteinoxidation. Darüber hinaus werden mathematische Methoden zur Auswertung der Messungen im Rahmen der Kompartimentmodellierung eingesetzt [12].

Die erzielten Ergebnisse werden in Projekten genutzt, bei denen Konzepte für eine Prävention des oxidativen Stresses bei verschiedenen Patientengruppen, z.B. durch den therapeutischen Einsatz von Antioxidantien oder durch Vermeidung der Entstehung und Freisetzung redoxaktiver Metabolite bzw. Schadstoffe, erarbeitet werden.

**Literatur**

1. Stadtman ER, Berlett BS. Reactive oxygen-mediated protein oxidation in aging and disease. *Drug Metab Rev* 30 (1998), S. 225-243.
2. Ross R. Atherosclerosis: an inflammatory disease. *New Engl J Med* 340 (1999), S. 115-126.
3. Pietzsch J. Atherogenese und Lipoproteine. In: Hanefeld M. (Hrsg.) *Statine: Neue Perspektiven der Behandlung von Fettstoffwechselstörungen und Prävention der Arteriosklerose*. UniMed-Verlag, Bremen (1999), S. 32-47.
4. Davies MJ, Fu S, Wang H, Dean RT. Stable markers of oxidant damage to proteins and their application in the study of human disease. *Free Radic Biol Med* 27 (1999), S. 1151-1163.
5. Pietzsch J. Measurement of 5-hydroxy-2-aminovaleric acid as a specific marker of iron-mediated oxidation of proline and arginine side chain residues of low density lipoprotein apolipoprotein B-100. *Biochem Biophys Res Commun* 270 (2000), S. 852-857.
6. Pietzsch J, Bergmann R. Analysis of 6-hydroxy-2-aminocaproic acid (HACA) as a specific marker of protein oxidation: The use of N(O,S)-ethoxycarbonyl trifluoroethyl ester derivatives and gas chromatography/mass spectrometry. *Amino Acids*. 26 (2004), S. 45-51.
7. Pietzsch J, Lattke P, Julius U. Oxidation of apolipoprotein B-100 in circulating low density lipoproteins is related to low density lipoprotein residence time: in vivo insights from stable isotope studies. *ArteriosclerThrombVasc Biol* 20 (2000), S. e63-e67.
8. Pietzsch J, Bergmann R. Measurement of 5-hydroxy-2-aminovaleric acid as a specific marker of iron-mediated oxidation of proline and arginine residues of low density lipoprotein apolipoprotein B-100 in human atherosclerotic lesions. *J Clin Pathol* 56 (2003), S. 622-623.
9. Pietzsch J, Bergmann R, Kopprasch R. Analysis of non-protein amino acids as specific markers of low density lipoprotein apolipoprotein B-100 in human atherosclerotic lesions: the use of N(O)-ethoxycarbonyl trifluoroethyl ester derivatives and GC-MS. *Spectroscopy*. (2004) Im Druck.
10. Yang C, Gu Z, Yang M, Lin S, Siuzdak G, Smith CV. Identification of modified tryptophan residues in apolipoprotein B-100 derived from copper ion-oxidized low-density lipoprotein. *Biochemistry* 38 (1999), S. 15903-15908.
11. Pietzsch J, Bergmann R, Wuest F, Grote M, Hultsch C, Pawelke B, van den Hoff J. Assessment of metabolism of native and oxidized low density lipoprotein in vivo: insights from animal positron emission tomography (PET) studies. *Amino Acids* 25 (2003) S. 120(abstract).
12. Willemsen AT, van den Hoff J. Fundamentals of quantitative PET data analysis. *Curr Pharm Des* 8 (2002) S. 1513-1526

## **Schätze im Protonenlicht >>**

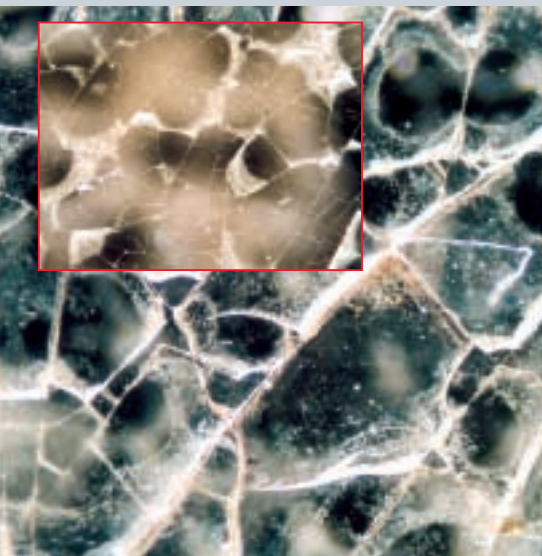
**Zerstörungsfreie Vorsorgeuntersuchung  
an Glaspretiosen**







**Abb 1:** Einzigartige Stücke aus der Zeit des Barock (Kunstgewerbemuseum Pillnitz, Dresden/Sachsen) haben den „Luft-Protonenstrahl“ schon gesehen und sind dabei unversehrt geblieben. Die endgültige Auswertung der Messdaten steht jetzt bevor.



**Abb 2:** Durch Korrosion geschädigte Glasoberfläche (Draufsicht) unter dem Rasterelektronenmikroskop (REM). Die Einwirkung von Feuchtigkeit lässt nach anfänglichen Auslaugungsprozessen ein feines Rissnetz entstehen. Wenn die feuchte Atmosphäre mit ihren Schadgasen hier weiter eindringt, bilden sich Schollen, die durch mechanischen Stress später abplatzen.

## Schätze im Protonenlicht

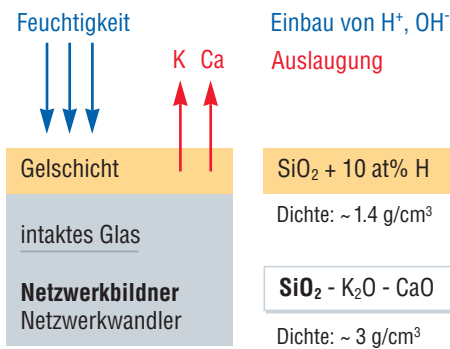
### Zerstörungsfreie Vorsorgeuntersuchung an Glaspretiosen

Christian Neelmeijer, Michael Mäder

Glas kann korrodieren wie Metall. Wenngleich die Prozesse andersartig ablaufen, das Resultat ist identisch. Umgebungsbedingte chemische Reaktionen zerstören die Materialien. Schadstellen an wertvollen Gemälden lassen sich restauratorisch festigen und ergänzen, für Unikate aus Glas besteht diese Chance nicht. Der Erhaltungszustand von Glasoberflächen kann bestenfalls eingefroren werden. Voraussetzung dafür ist, dass man ihn kennt und dass es möglich ist, die potentielle Gefahr umweltbedingter Schädigung für das einzelne Glasobjekt objektiv einzuschätzen. Der Schlüssel dazu ist die chemische Zusammensetzung des Glases. Zu niedriger Gehalt an Siliziumoxid und relativ hohe Anteile an Kaliumoxid und Kalziumoxid begünstigen den Alterungsprozess von Glas enorm. Bekannt dafür sind die farbigen Kalium-Kalzium-Silikatgläser mittelalterlicher Kirchenfenster. Ständige Feuchtigkeit im Zusammenspiel mit aggressiven Schadgasen in der Umwelt hat die Glasoberflächen verwittern lassen. Wettersteinkrusten aus Syngenit und Gips, bis zu Millimetern dick, trüben das Glas und nehmen den Farben ihre Brillanz [1]. Sicher konnten die Glasmacher jener Zeit den Einfluss der Zusammensetzung der Glasschmelze auf die Beständigkeit des fertigen Produkts. Die Technologie der Glasherstellung wurde jedoch bestimmt durch die verfügbaren Rohstoffe, den Entwicklungsstand der Schmelzöfen und ökonomische Zwänge.

Selbst unter dem Schutz von Klimaanlagen in den Museen altern die Schätze aus Glas (Abb. 1). Einige hochkarätige Pretiosen befinden sich heute bereits in einem außerordentlich kritischen Zustand. Das Schadensbild reicht von Trübung über feine Haarrisse und großflächige Rissnetze bis zur Schollenbildung, der Ablösung von Glasschichten und den Verlust von Farbfassungen (Abb. 2). Viele Objekte erscheinen, visuell beurteilt, heute noch in recht gutem Erhaltungszustand. Genau hier setzt unsere präventive Untersuchungsmethode ein, als Pendant zur lebensrettenden Krebsfrüherkennung bei Patienten. Ohne Probenahme gelingt es mittels zerstörungsfreier Materialanalyse solche Gläser aufzufinden, deren Zusammensetzung für Glaskorrosion kritisch ist. Für diese empfehlen wir dem Museum vorsorgliche Erhaltungsmaßnahmen, die das Fortschreiten korrosiver Prozesse stark verzögern. Im Vordergrund stehen spezielle Aufbewahrungsbedingungen bei optimaler Umgebungstemperatur, Feuchtigkeit und atmosphärischer Zusammensetzung. Ideale Klimavitrinen sind teure Spezialanfertigungen, folglich im Museum nicht für alle Ausstellungsstücke aus Glas denkbar. Insofern verfolgt die entwickelte Technik zur Selektierung der gefährdeten Stücke gleichfalls ein ökonomisches Ziel.

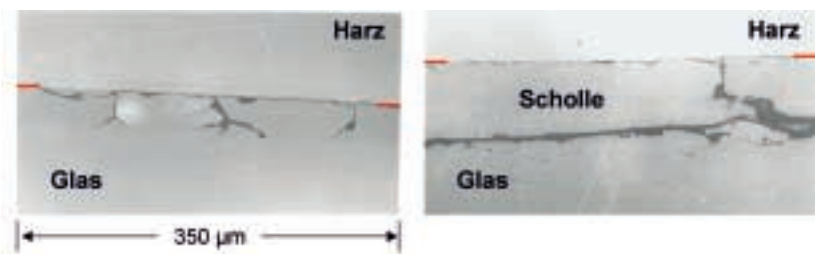
### Die Glaskrankheit



**Abb. 3:** Glas ist ein nichtkristalliner Festkörper. Seine ungeordnete Struktur hat eine Nahordnung, wir sprechen von einem Glasnetzwerk. Als Netzwerkbildner werden jene Kationen bezeichnet, deren mit Sauerstoff gebildete Polyeder das Netzwerk aufbauen ( $SiO_2$  im silikatischen Glas). Dagegen werden Kationen, die das Netzwerk auftrennen oder verändern, Netzwerkwanler genannt (Alkalien und Erdalkalien). Solche Trennstellen bewirken eine Schwächung der Glasstruktur und erniedrigen die Schmelztemperatur. Im Zuge der Auslaugung von Netzwerkwanlern aus der Glasoberfläche entsteht eine modifizierte Region veränderter Zusammensetzung und geringerer Dichte. Umfangreiche Untersuchungen (REM, RBS) an Querschliffen künstlich ausgelaugter Modellgläser (erschmolzenes Glas definierter Zusammensetzung) vermitteln die typische Zusammensetzung der geschädigten Schicht. Die  $^1H(^{15}N, \alpha\gamma)^{12}C$  Kernresonanzreaktion weist den im Auslaugungsprozess eingebauten Wasserstoff nach.

**Abb. 4:** Querschliff eines Glasscherbens (frühes 18. Jahrhundert) aus dem Museum, rot markiert ist der Verlauf der Glasoberfläche: links - Rissbildung an der einen Oberfläche, rechts - bereits Schollenbildung an der anderen Oberfläche. Rot markiert ist der Verlauf der Glasoberfläche.

Glas ist ein amorphes Material mit besonderer Zustandsform zwischen einem Festkörper und einer Flüssigkeit. Damit lassen sich auch die speziellen Eigenschaften dieses Materials erklären. „Glas ist ein anorganisches Schmelzprodukt, das im wesentlichen ohne Kristallisation erstarrt“, so sagt das Deutsche Institut für Normung [2]. Silikatgläser haben die größte Bedeutung und Verbreitung. Ihre oxidischen Komponenten entstehen in der Regel erst im Schmelzprozess aus anderen Verbindungen (Hydrate, Nitrate, Karbonate, Sulfate). Die relativen Anteile der Oxidkomponenten im Glasnetzwerk (z.B. Siliziumdioxid als Netzwerkbildner, Alkali- und Erdalkalioxide als Netzwerkwanler) bestimmen nicht nur die Schmelztemperatur, sondern auch die Resistenz des Glases gegenüber atmosphärischen Angriffen auf seine Oberfläche (Abb. 3). Die Chemie der Glasschadensbildung wird in ihren Grundzügen verstanden [3,4]: In die Oberfläche eindringende Feuchtigkeit löst chemische Bindungen im Glasnetzwerk und führt hauptsächlich zur Auslaugung der Alkali-Ionen (Kalium, Natrium), z.T. aber auch von Erdalkali-Ionen (Kalzium). Gleichzeitig dringen ionische Bestandteile des Wassers in das Glas ein und werden an freie Bindungen angelagert. Bis zu einigen hundert Mikrometern (tausendstel Millimeter) Tiefe kann die Glasoberfläche derart verändert werden, es bildet sich die sogenannte Gelschicht. Im Zuge der beschriebenen Prozesse entstehen mechanische Spannungen in der Glasoberfläche, diese verursachen die Ausbildung von Mikrorissen. Darin kann die Feuchtigkeit nun schnell weiter vordringen, wodurch Tiefe, Breite und Verzweigung der Risse wachsen. Wechselnde klimatische Bedingungen, z.B. veränderte Temperatur und schwankende Luftfeuchtigkeit, begünstigen das abwechselnde Anschwellen und Schrumpfen der auch in den Rissen entstandenen Korrosionsprodukte. Hierdurch werden die Spannungen in der Gelschicht verstärkt und das Rissnetzwerk intensiviert. Mechanisch bedingt, haben tiefe vertikale Risse auch Verzweigungen in horizontaler Richtung zur Folge. So entstehen Schollen, die späterhin als Ganzes abplatzen und zu irreparablen Materialverlust führen (Abb. 4). Die freigelegte frische Glasoberfläche ist nun bereit, das Spiel von neuem zu beginnen: Ausbildung der Gelschicht mit Rissnetz und abplatzenden Schollen. Über Jahrzehnte und Jahrhunderte wird die Glassubstanz einmaliger Kunstwerke durch diesen Teufelskreis nach und nach aufgebraucht. Das einzudämmen ist genau unser Ziel.

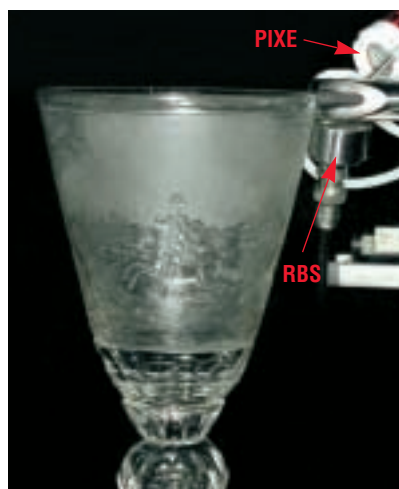


## Ionenstrahlanalyse an Luft

### Protonenstrahl an Luft



**Abb. 5:** Ionenstrahlen werden im Vakuum erzeugt und darin ohne Energieverlust weitergeleitet. Kunstobjekte dürfen nicht ins Vakuum gebracht werden. Hauchdünne Folien (wenige Mikrometer Dicke) aus Spezialwerkstoffen lassen den energiereichen Protonenstrahl in die Atmosphäre austreten. Das empfindliche Glasobjekt wird am Strahlaustritt an Luft positioniert und durch mehrere Messtechniken mit speziellen Detektoren in einem Arbeitsgang analysiert.



**PIXE**  
Protonen - induzierte  
Röntgenstrahlung

**RBS**  
Protonen - „Reflexion“

Historische Objekte aus Glas zeigen in ihrer Zusammensetzung eine beträchtliche Vielfalt. Verschiedene Glastypeen entstanden durch die sich wandelnde Verfügbarkeit der Rohstoffe und spezielle technologische Entwicklungen. So kennt man z. B. Natriumsilikatglas aus der Antike [5], farbloses Bleikristallglas mit hoher Brillanz wird seit dem 17. Jahrhundert in Böhmen hergestellt. Hinsichtlich ihrer Beständigkeit sind Kalium-Kalzium-Silikatgläser (Mittelalter [6], aber auch Barock) als besonders kritisch einzuschätzen [7]. Auf diesen Glastype konzentriert sich unsere Zusammensetzungsanalyse. Für jedes Glasobjekt auf dem „Prüfstand“ müssen zwei Fragen geklärt werden: Ist die Glasoberfläche bereits korrodiert, und wenn ja - wie dick ist dann die Gelschicht? Spricht die Zusammensetzung des darunter liegenden Kernglases für stabiles oder für korrosionsgefährdetes Material?

Museen und private Sammler setzen voraus, dass die Diagnose garantiert zerstörungsfrei erstellt wird. Die Entnahme selbst kleinster Glasproben aus intakten Originalen ist strikt verboten. Außerdem darf die Untersuchung im Glas keine sichtbaren Spuren hinterlassen. Die Ionenstrahlanalyse ist für diese Aufgabe maßgeschneidert (Abb. 5). Als ideal erweist sich die simultane Erfassung aller erforderlichen Informationen mit einer einzigen Messung. So wird das empfindliche Analysenobjekt nur geringfügig belastet. Der gebündelte Protonenstrahl mit 1 mm Durchmesser und einer Energie von 4 MeV (Millionen Elektronenvolt) verlässt das Vakuumsystem unseres Teilchenbeschleunigers durch eine dünne Metallfolie (HAVAR, 2 Mikrometer Dicke) und ist dann als analytisches Werkzeug an Luft verfügbar. Wenn ein Proton (Wasserstoff-Ion) das elektrische Feld von einer Million Volt durchläuft, wird es auf die Energie von 1 MeV beschleunigt. Unsere digitale Justiereinrichtung ermöglicht die präzise und reproduzierbare Positionierung auch für große Untersuchungsobjekte. Strahlstrom und Messzeit werden so klein gehalten, dass sichtbare Veränderungen im Glas mit Sicherheit ausgeschlossen werden können. Das verdanken wir der optimalen Anordnung aller beteiligten Messgeräte (Detektoren). Der komplette Messaufbau ist das Ergebnis unserer mehrjährigen, sukzessiven Forschungsarbeit. Die methodische Entwicklung unserer Vorsorgeuntersuchung erfolgte an erschmolzenen Modellgläsern vorrangig mittelalterlicher Zusammensetzung. Jetzt ist die Anlage fertiggestellt und diagnostiziert die bereits wartenden „realen Glaspatienten“.

## Ionenstrahl-Messtechniken

### PIXE (Particle Induced X-ray Emission)

Der Ionenstrahl dringt nahezu geradlinig in den Festkörper ein und wird dort abgebremst. Dabei übertragen die Ionen längs ihres Weges Energie auf die Elektronenhülle der Atome des Festkörpers. Als Antwort senden diese Röntgenstrahlung (Energie: keV, Kiloelektronenvolt) aus, die das Material verlässt und im Detektor nachgewiesen wird. Jedes chemische Element emittiert seine spezifische Röntgenstrahlung mit charakteristischer Energie (X-Achse im PIXE Spektrum). Die Intensitäten der charakteristischen Röntgenlinien (Y-Achse) geben Auskunft über die Konzentrationen der Elemente im durchstrahlten Materialvolumen. Das Verfahren gestattet eine Multielementanalyse mit Nachweisgrenzen oberhalb 0.01% Gewichtsanteil für Glas.

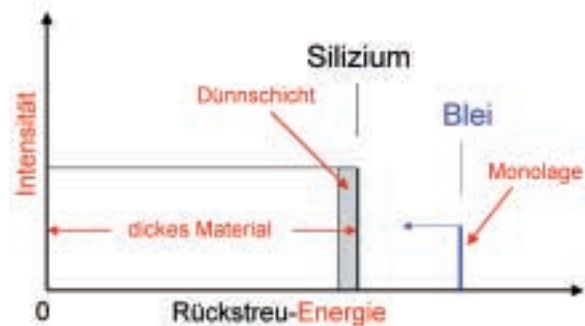
### PIGE (Particle Induced Gamma-ray Emission)

Die Messtechnik nutzt charakteristische Gammastrahlung (Energie: MeV, Megaelektronenvolt), die von den Atomkernen vorrangig leichter Elemente bei Wechselwirkung mit schnellen Protonen emittiert wird. Ähnlich PIXE enthält das PIGE-Spektrum diskrete, elementcharakteristische Linien. Die hohe Energie der Gammastrahlung ermöglicht das Durchdringen dickerer Materialschichten. Bei der Zusammensetzungsanalyse von Glas liefert PIGE Konzentrationen für das Hauptelement Silizium und die möglichen leichten Begleiter Bor, Natrium, Magnesium und Aluminium.

### RBS (Rutherford Backscattering Spectrometry)

Wenn Ionen auf Materie auftreffen, können sie an den Atomen der Oberfläche reflektiert (zurückgestreut) werden, wie beim elastischen Stoß zweier Kugeln. Werden von den Ionen nur Atome eines Elements als atomare Monolage vorgefunden, so erhalten alle gestreuten Ionen ein und dieselbe Rückstreuenergie (X-Achse im RBS-Spektrum). Die Intensität (Y-Achse) steht für die Anzahl von „getroffenen“ Atomen. Bei einer freitragenden Dünnschicht (keine Unterlage) würden die Ionen von Atomen in verschiedenen Tiefen reflektiert. Hier müssen die Ionen vor und nach dem Stoß Materie durchdringen, das führt zu Energieverlusten. Das RBS-Spektrum zeigt jetzt eine maximale Rückstreuenergie (Rückstreuung an der Oberfläche) und eine minimale Rückstreuenergie (Rückstreuung am Ende der Dünnschicht). Mit wachsender Schichtdicke nimmt die gemessene minimale Rückstreuenergie ab, für dickes Material liegt ihr Wert bei Null. Für die Rückstreuung an Atomen schwererer Elemente (z.B. Blei im Gegensatz zu Silizium) vergrößert sich das „Reflexionsvermögen“ im Stoß: es wird eine höhere Rückstreuenergie gemessen, analog zur größeren Sprunghöhe einer Stahlkugel nach Aufschlag auf Granit im Vergleich zu Kunststoff.

### RBS Rutherford Backscattering Spectrometry

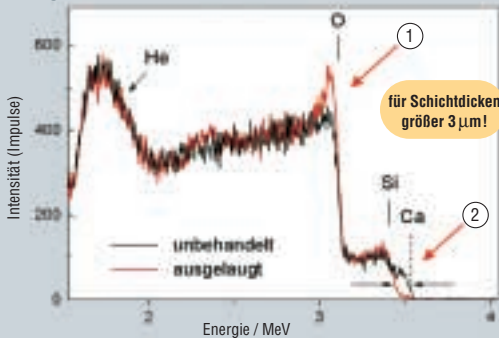


Die Signale verschiedener Elemente überlagern sich!

Das Ensemble von drei speziellen Halbleiterdetektoren (Röntgen-, Gamma- und Teilchendetektor) liefert simultan alle Informationen, die wir zur vollständigen Charakterisierung des Glases benötigen. Für die quantitative Zusammensetzungsanalyse von frisch erschmolzenem Kalium-Kalzium-Silikatglas ohne veränderte Oberfläche würde der energie-dispersive Röntgendetektor genügen, als Nachweismethode eignet sich hervorragend PIXE - die Messung materialcharakteristischer Röntgenspektren, erzeugt durch energiereiche Protonen. In knapp 30 Sekunden Messzeit lässt der Protonenstrahl intensive Röntgenlinien der Hauptelemente Silizium, Kalium und Kalzium entstehen. Spezielle PIXE-Software wandelt das gemessene Röntgenspektrum in Elementkonzentrationen. Damit wäre die Glaszusammensetzung gegeben. Die eigentlichen Probleme entstehen mit der Oberflächenkorrosion. Diese kann das Glas in jener Oberflächenregion verändert haben, aus welcher der Hauptbeitrag zum Röntgenspektrum entstammt. Für bleifreies Glas liegt die gesamte erfasste Informationstiefe von PIXE bei ca. 7 Mikrometern.

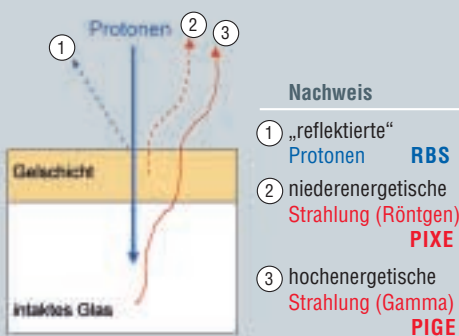
## Gealtertes Glas

### Veränderung der Glasoberfläche durch Auslaugung RBS



- ① Sauerstoff: an der Oberfläche
- ② Kalzium: Kantenverschiebung

**Abb. 6:** Die zerstörungsfreie Zusammensetzungsanalyse am Protonenstrahl lässt sich nur auf solche Glasobjekte anwenden, deren ausgelaugte Oberfläche höchstens 3 Mikrometer dick ist. Diese Vorauswahl ermöglicht uns sofort das RBS-Spektrum. Das Glas ist für die quantitative Ionenstrahlanalyse nicht mehr zugänglich, wenn Sauerstoff verstärkt an der Oberfläche gefunden wird und die sogenannte hochenergetische Kante von Kalzium (fast identisch mit der von Kalium) an ihrer markanten Stelle im RBS-Spektrum fehlt.



**Abb. 7:** Während der Protoneneinstrahlung liefert das Ensemble materialcharakteristischer Messsignale ein umfassendes analytisches Bild vom Glas. An der Oberfläche zurückgestreute Protonen informieren über die Dicke einer möglichen Korrosionsschicht. Hochenergetische Gammastrahlung liefert die Konzentration des Hauptelements Silizium im Glasvolumen. Die niederenergetische Röntgenstrahlung widerspiegelt vornehmlich die Elementzusammensetzung in einer oberflächennahen Glasregion.

Wird das intakte Glasvolumen von gewachsenem Wetterstein oder einer ausgedehnten Gelschicht bedeckt, so ist es für PIXE quantitativ nicht mehr zugänglich. Ob solche Deckschichten im konkreten Fall vorhanden sind, entscheidet ein Blick auf das Spektrum von RBS - die Energieverteilung an der Oberfläche „reflektierter“ Protonen (Abb. 6). Markante Signale kennzeichnen eine Oberflächenkorrosion genau dann, wenn die Dicke der veränderten Region bereits 3 Mikrometer erreicht hat. Die Sauerstoffkonzentration im oberflächennahen Bereich ist hier deutlich erhöht und das Spektrum zeigt keine charakteristische Kante für Rückstreuung an Kalzium-Oberflächenatomen. Das wissen wir aus systematischen Untersuchungen an künstlich ausgelaugten Modellgläsern (Kalium-Kalzium-Silikatglas definierter Zusammensetzung) [8]. Die beiden Effekte sind plausibel. Ist Kalzium (auch Kalium) aus der Oberfläche ausgelaugt, so fehlen diese Atome für die Streuprozesse mit maximaler Rückstreuenergie. Gleichzeitig wächst die Konzentration von Siliziumdioxid im Schadensgebiet. Für Oxidschichtdicken unter 3 Mikrometer reicht die Auflösung von RBS mit Protonen nicht mehr aus, um eine veränderte Dünnschicht von dem darunter liegenden intakten Glas analytisch zu trennen. Hier müssen wir nach Auswegen suchen (Abb. 7).

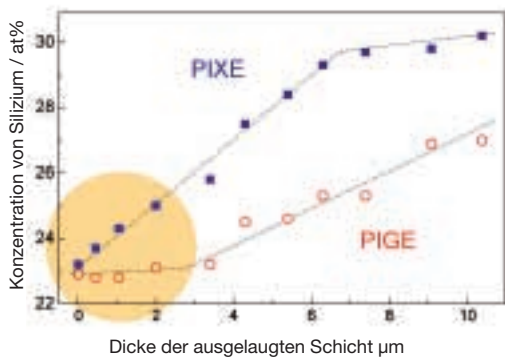
Der Protonenstrahl beweist dabei erneut seine Stärke. Er verschafft uns Zugang zur dritten Nachweisteknik, PIGE - die Messung materialcharakteristischer Gammaspektren bestimmter leichter Elemente (Silizium, aber auch Bor, Natrium, Magnesium, Aluminium). Die hochenergetischen Gamma-Strahlen können ohne nennenswerte Schwächung dickere Materialsichten durchdringen als Röntgen-Strahlen. Deshalb ist die Informationstiefe von PIGE für Silizium (Gamma-Linie 1.78 MeV, Mega-Elektronenvolt, d.h. Millionen Elektronenvolt) im Glas mehr als doppelt so groß, verglichen mit der von PIXE (Röntgen-Linie 1.74 keV, Kilo-Elektronenvolt, d.h. tausend Elektronenvolt). Die Kombination PIGE-PIXE eignet sich bestens, um modifizierte Glasoberflächen mit Dicken kleiner 3 Mikrometer zu identifizieren und sogar das darunter liegende intakte Glas in seiner Zusammensetzung exakt zu analysieren. Am künstlich gealterten Modellglas mit definierter Dicke der ausgelaugten Zone können wir das instruktiv demonstrieren (Abb. 8). Ohne Auslaugung (neues Glas) liefern PIGE und PIXE für das Element Silizium identische Konzentrationen. Sobald die Auslaugung von Kalium und Kalzium beginnt, wächst die Konzentration von Silizium an der Oberfläche und wird von PIXE sofort registriert. Zum Silizium-Signal von PIGE trägt insgesamt ein wesentlich größerer Tiefenbereich im Glas bei. Daher wirkt sich die geringe Veränderung an der Glasoberfläche zunächst noch nicht aus. Erst ab etwa 3 Mikrometer Schädigungstiefe reagiert auch das Mess-Signal von PIGE auf den Anstieg der Siliziumkonzentration im ausgelaugten Gebiet. Sobald dessen Dicke die Informationstiefe von PIXE (ca. 7 Mikrometer) überschritten hat, bleibt die Intensität der Silizium-Röntgenlinie konstant. Die Intensität der Silizium-Gammalinie wächst weiter an, weil die Informationstiefe von PIGE dann eben noch nicht erreicht ist.

Bei schwacher Korrosion an der Oberfläche, d.h. Schichtdicken kleiner 3 Mikrometer, gibt uns PIGE die richtige Konzentration für Silizium im intakten Glasvolumen.

Im PIXE-Spektrum des Glases lassen sich nach der Auslaugung deutliche Veränderungen feststellen (Abb. 9). Die reduzierten Intensitäten der Röntgenlinien von Kalium und Kalzium signalisieren die oberflächennahe Abreicherung beider Spezies, die höhere Intensität der Silizium-Linie zeigt die höhere Siliziumkonzentration in der ausgelaugten Schicht an. Ist die Korrosionsschicht dünn (kleiner 3 Mikrometer), so sind beide Effekte zwar präsent, aber nur schwach ausgeprägt. Die Röntgenstrahlung aus dem ungestörten Glasvolumen trägt in diesem Falle noch dominant zum PIXE-Spektrum bei. Hier ergibt sich eine echte Chance, aus den Messwerten von PIXE die richtigen Konzentrationen für Kalium und Kalzium im Glasvolumen gewinnen zu können - trotz modifizierter Oberfläche. Im Periodensystem sind Kalium und Kalzium benachbarte Elemente. Mögliche Einflüsse der dünnen Deckschicht auf die Stärke der Anregung beider Röntgenlinien im Glasvolumen und ihre Schwächung beim anschließenden Schichtdurchgang sollten vergleichbar sein. Eine Bestätigung dieser Annahme finden wir bei Betrachtung des Intensitätsverhältnisses der Röntgenlinien von Kalium und Kalzium: schwache Korrosion (z.B. 2 Mikrometer ausgelaugtes Modellglas) verändert dieses nur geringfügig. Somit wird das Verhältnis der Konzentrationen von Kalium und Kalzium im Glasvolumen durch PIXE beinahe richtig gemessen (Abb. 9).

Wir kennen nun die Konzentration von Silizium im Glasvolumen (PIGE) und wir haben einen guten Näherungswert für das Konzentrationsverhältnis von Kalium und Kalzium (PIXE). Wir setzen voraus, dass diese Elemente in natürlicher Oxidform vorliegen, und dass die Gesamtkonzentration der Oxide im Glas 100% beträgt. Damit ist die Zusammensetzung des Glases annähernd gegeben.

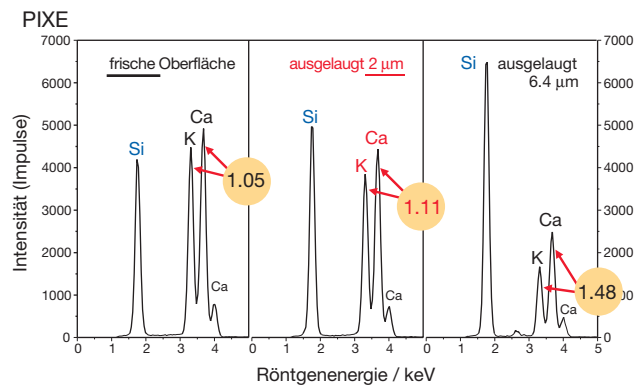
**Glasoberfläche mit ausgelaugter Dünnschicht**



Silizium: Konzentration (PIXE) > Konzentration (PIGE)

**Abb. 8:** Dünne Korrosionsschichten (Dicke kleiner 3 Mikrometer) erkennt man durch erhöhte Konzentration von Silizium im Oberflächenbereich (Silizium-Nachweis mittels PIXE) verglichen mit der Siliziumkonzentration im Glasvolumen, die von PIGE hier korrekt gemessen wird.

**Ausgelaugte Oberfläche von Kalium-Kalzium-Silikatglas**



Intensitätsverhältnis Kalzium/Kalium: fast richtig bei Dünnschicht

**Abb. 9:** Mit zunehmender Dicke einer ausgelaugten Oberflächenregion verändert deren Absorptionsverhalten das Verhältnis der Linienintensitäten von Kalium und Kalzium im PIXE Spektrum. Deshalb ist dieses Intensitätsverhältnis nur im Falle sehr dünner Schichten als Näherungswert für das Glasvolumen nutzbar.

## Korrekturen anbringen

### Glas: 10 h künstlich ausgelaugt

Konzentration in gew%			
	homogenes Gas PIXE	Schichtmodell PIGE-PIXE	nominelle Konzentration
Si	31.5	28.4	28.1
K	10.9	12.2	12.5
Ca	14.0	17.5	17.8
O	43.6	41.9	41.6

nach Schritt 1:

$d(\text{Si}) = 1.5 \mu\text{m}$      $d(\text{K}) = 2.3 \mu\text{m}$      $d(\text{Ca}) = 0.8 \mu\text{m}$

nach Schritt 2:

$d(\text{Si}) = 1.5 \mu\text{m}$      $d(\text{K}) = 1.7 \mu\text{m}$      $d(\text{Ca}) = 1.6 \mu\text{m}$

**Abb. 10:** Protonenstrahlanalyse (PIXE und PIGE) eines Kalium-Kalzium-Silikatglases definierter Zusammensetzung (Modellglas) und künstlich erzeugter Gelschicht an der Oberfläche. Erst die Kombination PIGE-PIXE und die PIXE-Simulation für „Glassubstrat plus ausgelaugte Deckschicht“ liefern die richtige Zusammensetzung des unveränderten Kernglases. Gute Werte für die Dicke der Gelschicht bekommt man im zweiten Schritt der Simulationsrechnung.

## Wie nahe an der Realität

Im Zuge umfangreicher Untersuchungen an verschiedenem Modellglas haben wir ein Verfahren entwickelt, das die Simulation des gemessenen PIXE-Spektrums gestattet und unsere Ergebnisse entscheidend verbessert. Die verfügbare PIXE-Software enthält eine Option für die Ausführung der Simulationsrechnungen. Als Basis steht das in Abb. 3 vorgestellte Schichtmodell: dickes Glas - bestehend aus den Oxiden von Silizium, Kalium und Kalzium - mit einer Deckschicht aus Siliziumdioxid (plus 10% Wasserstoffatome) und  $1.4 \text{ g/cm}^3$  Dichte [8]. Im ersten Schritt wird die Dicke der ausgelaugten Zone variiert, bis die Gesamtkonzentration für Siliziumdioxid (Beiträge vom Glasvolumen und der Deckschicht) übereinstimmt mit dem Ergebnis der PIGE-Messung. Der zweite Schritt der Simulation korrigiert den Näherungswert für das Verhältnis der Konzentrationen von Kaliumdioxid und Kalziumoxid. Die richtigen Konzentrationen sind dann erreicht, wenn die im ersten Schritt berechnete Dicke der ausgelaugten Deckschicht (für Silizium-Röntgenstrahlung) im zweiten Schritt auch für die Röntgenstrahlung von Kalium und Kalzium bestätigt wird. Man denke daran, dass die korrodierte Oberfläche für durchtretende Röntgenstrahlung von Silizium, Kalium und Kalzium aus dem Kernglas als natürlicher Absorber wirkt.

Als Beispiel betrachten wir Kalium-Kalzium-Silikatglas bekannter Zusammensetzung nach 10 Stunden Auslaugung in verdünnter Salzsäure (Abb. 10). Wird die veränderte Oberfläche bei einfacher PIXE-Analyse ignoriert, so weichen die erhaltenen Analysewerte bis zu 27 % (Wert für Kalzium) von der nominellen Konzentration ab. Bei Anwendung des Schichtmodells (intaktes Glas plus ausgelaugte Zone) und Korrekturen durch Simulationsrechnung verringert sich die Abweichung hier auf 1.7 % und liegt damit innerhalb der Grenzen des Messfehlers. Die Dicke der ausgelaugten Oberfläche (ca. 2 Mikrometer, gemessen am Rasterelektronenmikroskop) gibt unser zerstörungsfreies Verfahren (1.6 Mikrometer, Mittelwert) nach der Simulationsrechnung in ausreichender Näherung an.

Die methodische Entwicklung haben wir an erschmolzenen Modellgläsern durchgeführt. Das war notwendig, um die Ergebnisse der zerstörungsfreien Messungen von der Glasoberfläche durch Untersuchungen an Querschliffen im Rasterelektronenmikroskop kritisch prüfen zu können. Umweltbedingte Prozesse an Oberflächen historischer Gläser haben dann lediglich dünn-schichtige Veränderungen hervorgebracht, wenn der Umwelteinfluss stark eingegrenzt war. Das ist für die meisten Ausstellungsstücke in Museen und Sammlungen gegeben, nicht aber für archäologische Funde. Bruchstücke natürlich gealterter Glasobjekte sind in den Museen kaum auffindbar. Im günstigen Falle wäre die Sammlung auch dann nur selten bereit, Teile dieses Fundus für wissenschaftliche Zwecke zu opfern. Von einer singulären Untersuchung am Fragment eines barocken Glases haben wir erste Erkenntnisse über die Auslaugung bei schwachem natürlichen Angriff über sehr lange Zeit. Im Gegensatz zur zeitgerafften Auslaugung im Labor, enthält die Gelschicht solcher Kalium-Kalzium-Silikatgläser eventuell doch noch Anteile des Elements Kalzium, während Kalium vollständig ausgelaugt ist. Diesbezüglich muss unser Simulationsmodell angepasst werden, bevor wir die bereits erfolgten Messungen an zahlreichen vorgeschädigten Barockgläsern des sächsischen Hofes (Kunstgewerbemuseum Pillnitz, Dresden/Sachsen) sinnvoll auswerten können.



Für die Anwendung des Verfahrens interessierte sich auch Dr. H. Ricke, Direktor des Kunstmuseums der Stadt Düsseldorf, mit inventarisierten Gläsern aus dem Glasmuseum Hentrich. Weder das visuelle Gutachten noch RBS und die Kombination PIGE-PIXE konnten auf diesen Glasoberflächen Korrosion nachweisen. Eine eventuelle hydratisierte Schicht (Gelschicht) auf der Oberfläche der Glasobjekte ist demnach dünner als 0.3 Mikrometer. Unsere Analysewerte können die überraschende Beständigkeit dieser Glasobjekte erklären. Überwiegend wurden hohe Gehalte am Netzwerkbildner Siliziumdioxid (mehr als 64% Gewichtsanteil) gefunden. In einem Fall (55% Gewichtsanteil Siliziumdioxid) wurde die chemische Beständigkeit des Glases offensichtlich durch Zugabe einer außergewöhnlich großen Kalkmenge (21% Gewichtsanteil Kalziumoxid) erzielt.

### Das Verfahren im Überblick

Analyse: intakte Glasobjekte aus Museen und Sammlungen

Messtechnik	Zielstellung	Information
1. PIGE-PIXE:	Qualitative Elementanalyse	Kalium-Kalzium-Silikatglas?
2. RBS:	Signale von Sauerstoff und Kalzium (Kalium)	Korrosionsschicht dicker 3 µm? Ja: keine Analyse möglich !
3. PIGE-PIXE: PIGE:	Konzentrationen von Silizium	dünne ausgelaugte Zone? korrekte Siliziumkonzentration
4. PIXE:	Werte für das Verhältnis der Konzentrationen Kalium zu Kalzium	Näherungswerte für die sich anschließende PIXE-Simulation
5. PIXE-Simulation:	dickes Glas ( $\text{SiO}_2 + \text{K}_2\text{O} + \text{CaO}$ ) unter Deckschicht ( $\text{SiO}_2 + 10\% \text{ H-Atome}$ ) mit Dichte $\rho = 1.4 \text{ g/cm}^3$	richtige Konzentrationen von Kalium und Kalzium, Dicke der Korrosionsschicht

### Danksagung

Unser besonderer Dank gebührt Herrn Prof. Manfred Schreiner, Akademie der Bildenden Künste Wien, für seine wertvolle beratende und praktische Unterstützung in allen Fragen zur Chemie des Glases und dessen umweltbedingte Reaktionen. Gleichfalls danken wir Frau Dr. H. Römich (Fraunhofer-Institut für Silikatforschung Würzburg) und Herrn Dr. W. Müller (Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung) für fruchtbare Diskussionen und kompetente Ratschläge.

Die Arbeiten wurden durch das BMBF (Projekt 03NE9R01-7) finanziell unterstützt.

#### Literatur:

- [1] M. Schreiner, Deterioration of stained medieval glass by atmospheric attack, *Glastechnische Berichte* 61 (1988), S. 197-204
- [2] DIN 1 259: Glas. Begriffe für Glasarten und Glasgruppen. September 1986
- [3] H. Scholze, Chemical durability of glasses, *Journal of Non-Crystalline Solids* 52 (1982), S. 91-103
- [4] P.B. Adams, Glass corrosion: A record of the past? A predictor of the future?, *Journal of Non-Crystalline Solids* 67 (1984), S. 193-205
- [5] C. Lilyquist, R.H. Brill (eds.), *Studies in Early Egyptian Glass*, New York, The Metropolitan Museum of Art (1992)
- [6] K.H. Wedepohl, *Mittelalterliches Glas in Mitteleuropa: Zusammensetzung, Herstellung, Rohstoffe*, Nachrichten der Akademie der Wissenschaften Göttingen, Vandenhoeck Ruprecht, Göttingen (1998)
- [7] T.M. El-Shamy, The chemical durability of  $\text{K}_2\text{O}-\text{CaO}-\text{MgO}-\text{SiO}_2$  glasses, *Physics and Chemistry of Glasses* 14 (1973), S. 1-5
- [8] M. Mäder, *Zerstörungsfreie Charakterisierung historischer Glasobjekte mittels Ionenstrahlen*, Dissertation (2002), Technische Universität Dresden, auch als wissenschaftlich-technischer Bericht in: FZR-371 (2003)



## Ereignisse

Personalia | Preise | Termine

### Personalia

#### Neuer Wissenschaftlicher Direktor



Prof. Dr. Bernd Johannsen

Prof. Dr. Bernd Johannsen löste zum 1. März 2003 den bisherigen wissenschaftlichen Direktor des Forschungszentrums, Prof. Dr. Frank Pobell, ab. Der Chemiker Johannsen, dessen Spezialgebiete die Rhenium- und Technetium-Chemie und damit die Entwicklung von Radiopharmaka für nuklearmedizinische Anwendungen sind, kam 1992 von der Charité Berlin als Direktor des Instituts für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie an das Forschungszentrum und baute das erste PET-Zentrum in den Neuen Bundesländern auf. Er wurde bei einer feierlichen Veranstaltung am 3. März vom Kuratoriumsvorsitzenden des FZR und Staatssekretär im Sächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst, Herrn Dr. Frank Schmidt, in sein neues Amt eingeführt.

Im Berichtsjahr 2003 oblag dem neuen wissenschaftlichen Direktor u.a. die Erarbeitung und Einführung von Programmbudgets, die Profilierung der Forschungsgebiete in den Instituten und der Aufbau des Hochfeldlabors Dresden auf dem Gelände des Forschungszentrums.

#### Neuer Direktor des Instituts für Radiochemie



Prof. Dr. Gert Bernhard

Prof. Dr. Gert Bernhard steht seit dem 1. November 2003 dem Institut für Radiochemie als Direktor vor. Der Radiochemiker Bernhard brachte nach der Wende seine Erfahrungen in der Actinidenchemie in die Arbeit des Instituts ein. Diese hatte er sich bei der chemischen Aufarbeitung bestrahlter Reaktorbrandelemente zum Zwecke der Herstellung des Nuklids Molybdän-99, dem Mutternuklid des nuklearmedizinisch relevanten Technetium-99m, erworben. Nicht zuletzt ihm ist es zu verdanken, dass das Institut sich in den letzten Jahren zum deutschen Kompetenzzentrum für Uranchemie entwickelt hat.

Die Neustrukturierung des Instituts für Radiochemie durch Prof. Bernhard greift bereits zum 1. Januar 2004. Bei der Erforschung der Migration von Actiniden - Uran, Neptunium, Plutonium, Americium und Curium - in der Umwelt sollen neben Wässern, Böden, Gesteinen und Mineralen zukünftig biologische Fragestellungen stärker verfolgt werden. Daneben rücken Forschungen zur Endlagerproblematik vermehrt in den Fokus des Interesses.

#### Bundesverdienstkreuz für Prof. Frank Pobell



Prof. Dr. Frank Pobell

Im November 2003 verlieh der Bundespräsident das Bundesverdienstkreuz 1. Klasse des Verdienstordens der Bundesrepublik Deutschland an Prof. Dr. Frank Pobell. Für diese hohe Auszeichnung vorgeschlagen wurde er vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF). Das BMBF ehrte damit Prof. Pobell als erfolgreichen Forscher, Hochschullehrer, Forschungsmanager und Forschungspolitiker, der „in dieser seltenen Kombination viel für Deutschland geleistet“ hat.

## Preise 2003



André Rossberg



Hans-Georg Willschütz



Dr. Christian Jung

Im Jahr 1996 kam Prof. Pobell als Wissenschaftlicher Direktor an das Forschungszentrum Rossendorf (FZR), dessen Geschicke er 7 Jahre lang leitete. In diese Zeit fiel auch seine Funktion als Präsident der Leibniz-Gemeinschaft, zuvor war er unter anderem einer der Vize-Präsidenten der IUPAP, der Internationalen Union für Reine und Angewandte Physik. Heute engagiert sich Prof. Pobell für den Aufbau des Hochfeldlabors Dresden, das im Forschungszentrum Rossendorf ab 2007 die europaweit höchsten gepulsten Magnetfelder erzeugen soll. Seit 1999 ist er zudem Mitglied der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig.

### Doktorandenpreis der Fachgruppe Nuklearchemie der Gesellschaft

#### Deutscher Chemiker (GDCh) für André Rossberg (Institut für Radiochemie)

Erhalten hat Herr Rossberg den mit 500 Euro dotierten Preis in München auf der Jahrestagung der GDCh für seine Promotion mit dem Titel „Anwendung der Faktorenanalyse auf die Röntgenabsorptionsspektroskopie zur Bestimmung der Speziation von Uran in Lösungen“. Die Arbeit fokussiert auf die Anwendung des neuen Auswertverfahrens der strukturaufklärenden Röntgenabsorptionsspektroskopie für die Speziationsbestimmung von Radionukliden in aquatischen umweltrelevanten Systemen.

### Siempelkamp Kompetenzpreis 2003

#### für Hans-Georg Willschütz (Institut für Sicherheitsforschung)

Dieser ebenfalls mit 500 Euro dotierte Preis wurde Herrn Willschütz auf der Jahrestagung Kerntechnik im Mai 2003 für seinen Vortrag „Erkenntnisse aus den Experimenten der FOREVER-Reihe und den begleitenden Finite-Elemente-Rechnungen“ verliehen. Für seine integralen Untersuchungen eines Reaktordruckbehälters unter dem Einfluss eines Kernschmelzesees wurde er, gemeinsam mit Herrn Dr. Eberhard Altstadt, bereits 2002 mit dem Forschungspreis des FZR ausgezeichnet.

### FZR-Preise 2003

#### Doktorandenpreis

Dr. Christian Jung. „Synthese und Charakterisierung von fettsäuretragenden Technetiumkomplexen und deren Vorstufen“

Herr Dr. Jung schloss sein Promotionsverfahren im Oktober 2003 mit „summa cum laude“ ab. Die preiswürdige Arbeit liefert Beiträge und Anregungen zu einer bioverträglichen radioaktiven Markierung von Fettsäurederivaten. Sie zeigt ausgewählte Wege zur Synthese koordinationsfähiger Liganden, beschreibt die Darstellung und Charakterisierung entsprechender Rhenium-Modellverbindungen und dokumentiert im Einzelfall den Transfer zu Technetium-Präparaten. Die interdisziplinäre Arbeit von Herrn Dr. Jung sowie biologische Untersuchungen in Kooperation mit der medizinischen Fakultät der TU Dresden haben einen bedeutenden Beitrag zur Radiopharmaka-Forschung geleistet und fanden ihren Niederschlag in einer Patentanmeldung.



v.l.n.r.: Jenny Phillip, Manfred Sobiella, Renate Förster, Liane Heinrich, Klaus Heidel, Martina Paul und Jochen Hutsch

### Technologiepreis

Manfred Sobiella, gemeinsam mit Renate Förster, Klaus Heidel, Liane Heinrich, Jochen Hutsch, Martina Paul und Jenny Phillip

„Entwicklung und Umsetzung der Technologie zur Herstellung von Präzisions-Vieldrahtkammern zum ortsempfindlichen Nachweis geladener Teilchen“

Die von der Arbeitsgruppe entwickelte Technologie für Präzisions-Vieldrahtkammern im Detektorlabor ermöglicht eine neue Genauigkeitsstufe in der Ortsauflösung beim Nachweis von geladenen Teilchen mit einer Abdeckung eines großen Raumwinkels. Diese Technologie ist Vorbild für den Bau ähnlicher Kammern in führenden europäischen Instituten (IN2P3/Orsay, JINR/Dubna). Die im FZR gefertigten Vieldrahtkammern sind im komplexen Detektorsystem HADES (High Acceptance Di-Electron Spectrometer) bei der GSI in Darmstadt erfolgreich im Einsatz und ermöglichen so den Wissenschaftlern des FZR eine Teilnahme am derzeit größten europäischen Kernphysik-Experiment.



v.l.n.r.: Dr. Ronald Schwengner, Dr. Harald Schnare, Prof. Dr. Stefan Frauendorf, Dr. Friedrich Döna, Prof. Dr. Bernd Johannsen

### Forschungspreis

Dr. Vesselin Dimitrov, Dr. Friedrich Döna, Prof. Dr. Stefan Frauendorf, Dr. Cristina Plettner, Dr. Harald Schnare, Dr. Ronald Schwengner

„für theoretische und experimentelle Forschungsarbeiten zu neuen Symmetrien rotierender Atomkerne“

Die theoretischen und experimentellen Untersuchungen der Rossendorfer Gruppe erklären neuartige quantenmechanische Phänomene der Rotation von Atomkernen. Das hierzu entwickelte Konzept der magnetischen Rotation hat sich als sehr erfolgreich bei der Interpretation einer Vielfalt von experimentellen Daten und der Vorhersage des Auftretens in bestimmten Massengebieten erwiesen. Durch die Arbeiten wurde ein neues Gebiet der modernen Kernphysik begründet und ein bedeutender Beitrag zum Verständnis quantenmechanischer Vielteilchensysteme geleistet. Die Ergebnisse der Untersuchungen wurden inzwischen auch auf andere Vielteilchensysteme wie metallische Cluster übertragen und sind daher über das Gebiet der kernphysikalischen Grundlagenforschung hinaus relevant.

### Termine



### Die Himmelscheibe von Nebra zu Gast im Forschungszentrum Rossendorf

Anfang Januar 2003 war die Himmelscheibe von Nebra zur Untersuchung der Gold-Tauschierungen im Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung. Dieses Kunstobjekt gilt mit seinen 3600 Jahren als älteste Himmelsdarstellung der Menschheit. Die Materialanalyse konnte im Ionenstrahlzentrum an dem an Luft ausgeführten Protonenstrahl zerstörungsfrei vorgenommen werden. Die Untersuchungsergebnisse wurden im Rahmen einer Diplomarbeit an der TU Bergakademie Freiberg zusammengefasst und sollen vom Eigentümer des archäologischen Fundes, dem Landesamt für Archäologie Sachsen-Anhalt, demnächst veröffentlicht werden.



Dr. Matthias Rößler, Staatsminister für Wissenschaft und Kunst des Freistaates Sachsen, Christoph Matschie, Parlamentarischer Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung und Forschung, Prof. Bernd Johannsen, Dr. Peter Joehnk

### **Einweihung der Thermohydraulik-Großversuchsanlage TOPFLOW**

Die Anlage TOPFLOW (Transient Two Phase Flow Test Facility) konnte im **Februar 2003** nach nur 17-monatiger Bauzeit feierlich eingeweiht werden. Der Testbetrieb nahm 12 Monate in Anspruch und die Abnahme der Anlage durch den TÜV konnte bereits am 23. September erfolgen. Die Anlage TOPFLOW, alle wichtigen Parameter und die ersten Ergebnisse sind im Beitrag von Dr. Horst-Michael Prasser auf den Seiten 10 - 21 dargestellt.

### **Grundsteinlegung für das Hochfeldlabor Dresden am 28. Mai 2003**

Am 28. Mai 2003 fand die Grundsteinlegung für das Hochfeldlabor Dresden statt, eines der insgesamt neun Großgeräteprojekte, die vom Wissenschaftsrat 2002 im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) begutachtet wurden. Lediglich zwei Großgeräte wurden ohne Einschränkung und zur sofortigen Umsetzung vorgeschlagen, und das Hochfeldlabor gehörte in diese Top-Gruppe: „Forschungsprogramm und technischer Projektvorschlag liegen in überzeugender Weise vor“, so der Wissenschaftsrat in seinem Urteil. Bundesforschungsministerin Bulmahn hielt sich an die Empfehlungen des Rates und gab im Februar 2003 grünes Licht für vier der neun begutachteten Großgeräte. Die Investitionskosten für das Hochfeldlabor Dresden belaufen sich auf 24,5 Millionen Euro, sie werden vom Bund und vom Freistaat Sachsen zu gleichen Teilen finanziert.

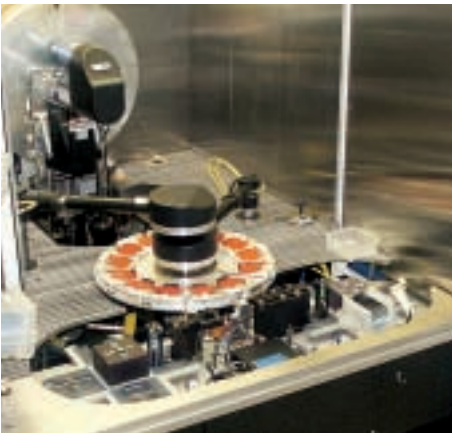
Das Hochfeldlabor Dresden soll ab 2006 lange gepulste Magnetfelder in bisher unerreichten Feldstärken von bis zu 100 Tesla erzeugen und damit neue Erkenntnisse in vielen Bereichen der Physik, aber auch der Chemie und der Biologie ermöglichen. Der Projektleiter, Prof. Frank Pobell, erläutert: „Heute können Magnetfelder mit kommerziell erhältlichen, supraleitenden Spulen bis etwa 20 Tesla erzeugt werden - zum Vergleich: das Erdmagnetfeld hat eine Stärke von 50 Mikrottesla, ein Eisenjoch bringt höchstens 3 Tesla zustande. Das Ziel des Dresdner Hochfeldlabors ist die Bereitstellung von Magnetfeldern bis 60 Tesla bei Pulsdauern von 1 Sekunde und bis 100 Tesla für 10 Millisekunden. Damit wird das Dresdner Labor das führende europäische Pulslabor und verkleinert die Kluft zwischen den USA und Europa, die sich durch den Aufbau des amerikanischen Hochfeldlabors in Los Alamos in den neunziger Jahren aufgetan hat.“

Der Grundsteinlegung ging die Gründung eines Konsortiums unter Federführung des Forschungszentrums Rossendorf und der erfolgreiche Bau und Einsatz eines Pilotlabors im Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung (IFW) in Dresden voraus. Für den 150-seitigen Projektvorschlag, der dem Wissenschaftsrat zur Begutachtung vorgelegt wurde, zeichneten neben dem Forschungszentrum Rossendorf und dem IFW das Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, das Max-Planck-Institut für chemische Physik fester Stoffe und das Institut für Angewandte Physik der Technischen Universität Dresden verantwortlich.

Das Hochfeldlabor Dresden wird im FZR in unmittelbarer Nähe zur Strahlungsquelle ELBE aufgebaut. Dadurch ergibt sich die einzigartige Möglichkeit, Europas intensivsten durchstimmbaren Infrarotstrahl von den Freie-Elektronen-Lasern der Strahlungsquelle

ELBE in das Hochfeldlabor zu führen und mit den hohen Magnetfeldern zu kombinieren. Dies ist deshalb so interessant, weil in vielen Substanzen durch hohe Magnetfelder Zustände erzeugt werden, deren Energie genau der Lichtenergie im infraroten Bereich entspricht. Diese weltweit einzigartige Kombination wird eine Vielzahl interessanter Untersuchungen zum Magnetismus, der Supraleitung, der Halbleiterphysik und im Bereich der Nanostrukturen ermöglichen.

Das Richtfest konnte ebenfalls schon im Berichtsjahr begangen werden. Am 10. Oktober lud die Baufirma Wolff und Müller zum Feiern ein. Das neue Gebäude hat somit ein festes Dach und kann planmäßig über den Winter ausgebaut werden.



#### **Einweihung der neuen Hochenergie-Beamline ISIS zur Behandlung von Leitungshalbleitern**

Am 29. September 2003 wurde eine neue Hochenergie-Beamline für die Halbleitertechnologie, eine Kooperation zwischen der nanoparc GmbH und dem Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, im FZR eingeweiht. Die Anlage ISIS (Industrial Semiconductor Implantation System) ermöglicht die kommerzielle Umsetzung einer neuen Technologie, die die Eigenschaften von Leistungshalbleitern signifikant verbessert. Dabei werden Bauelemente auf Silizium-Wafern mit hochenergetischen Helium-Ionen beschossen. Durch dieses so genannte „Defect-Engineering“ wird die Verlustleistung der Bauelemente reduziert und damit das Schaltverhalten optimiert. Die nanoparc GmbH ist eine Ausgründung des Forschungszentrums, Geschäftsführer ist Dr. Thoralf Gebel.

Schließlich sollen an dieser Stelle die folgenden Termine nicht unerwähnt bleiben, an denen das FZR aktiv teilgenommen hat:

**Karriere-Start in Dresden** | Teilnahme beim Gemeinschaftsstand von BioMet e.V.  
24. - 26. Januar 2003

**Hannover-Messe der Industrie** | eigener Stand des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung, außerdem Einzel-Stände von Wissenschaftlern aus dem Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung und dem Institut für Radiochemie unter dem Dach der Initiative Forschungsland Zukunft | 07. - 12. April 2003

**Sommerschule Mikroelektronik Dresden** | eine Nachwuchs-Initiative von Infineon Technologies GmbH, AMD u. a. | 07. - 13. September 2003

**Teilnahme des FZR am Leibniz-Abend in Brüssel** | Vertreter des Instituts für Ionenstrahlphysik und Materialforschung sowie Dr. Peter Joehnk und Prof. Frank Pobell in seiner Funktion als Past-Präsident der Leibniz-Gemeinschaft | 23. September 2003

## Schüler und Lehrer

## Bildung

### Schüler und Lehrer | Ausbildung im FZR Tanz der Elemente | Tag der offenen Tür

Am 10. Februar fand im Forschungszentrum die bereits zur Tradition gewordene Lehrerfortbildung unter dem Motto „Starke und schwache Magnetfelder für die Forschung“ statt. Mehr als 100 Lehrer nahmen an der wegen der Kombination aus wissenschaftlichen Fachvorträgen und praxisbezogenem Besichtigungsprogramm äußerst beliebten Fortbildungsveranstaltung teil.

Das FZR bietet neben dieser jährlichen Lehrerfortbildung während des ganzen Jahres für Lehrer- und Schülergruppen die Möglichkeit zur Weiterbildung bzw. zur Besichtigung der vielfältigen Forschungsanlagen auf dem Forschungsgelände. Rund 165 Lehrer nutzten im Berichtszeitraum diese Möglichkeit, insgesamt 50 Gruppen besuchten das Forschungszentrum und es wurden mehr als 3.000 Besucher gezählt.

Ebenfalls zu einer unverzichtbaren Tradition geworden sind die Schülerpreise für die besten Besonderen Lernleistungen im Fachbereich Physik in Sachsen. Dieser Preis wird in Zusammenarbeit mit den vier sächsischen Universitäten - TU Dresden, TU Chemnitz, TU Bergakademie Freiberg und Universität Leipzig - vergeben. Als Sponsoren sind die Infineon Technologies GmbH sowie die Deutsche Physikalische Gesellschaft zu nennen. Die preiswürdigen Arbeiten werden von den sächsischen Gymnasien nominiert und bestehen entweder aus der schriftlichen Besonderen Lernleistung oder aus einer vergleichbaren Facharbeit auf dem Gebiet der Physik. Die zehn preisgekrönten Arbeiten 2003 und die Preisträger sind im Folgenden aufgeführt:

- Untersuchung und Charakterisierung der Lebensdauer und des Betriebsfestigkeitsverhaltens einer Schließring-Bolzen-Verbindung
  - > Thomas Pampel und Max Stiehl
- Virtuelle Darstellung des Ostwaldschen Farbkegels
  - > Klaus Hauschild und Martin Zwirner
- Zur Oberflächentopographie dünner Polymerfilme
  - > Norman Metzner
- Einsatz multifunktionaler Strukturen zur Temperierung solarbestrahlter Verkleidungselemente
  - > Thomas Kessler
- Untersuchung der elektronischen Eigenschaften von  $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$  mittels de Haas-van Alphen Effekt
  - > Felix Sinne
- Magnetische Nanostrukturen
  - > Wille Hagen
- Die Gaußkanone
  - > Markus Petzold und Matthias Schulz



- Darstellung der Messwerte einer Solaranlage im WWW
  - > André Riedel
- Bestimmung des Ladezustandes von NiCd-Akkus
  - > Franziska Jach
- Die Geschichte und die Funktionsweise einer Central Processing Unit
  - > Jan Kempa



Die Preise wurden im Rahmen des Tags der offenen Tür am 27. September im Forschungszentrum Rossendorf feierlich überreicht. Den Vortrag hat, stellvertretend für alle Preisträger, Herr Hagen Wille zum Thema „Magnetische Nanostrukturen“ gehalten. Der Vertreter von Infineon Technologies, Herr Dr. Alexander Ruf, nutzte im Anschluss an die offizielle Preisverleihung die Gelegenheit, die jungen Preisträger kennen zu lernen. Alle wurden zudem von Infineon zu einer individuellen Besichtigung des Dresdener Werks eingeladen.

### Ausbildung im FZR



Claudia Neißer im Reinraum

Das Forschungszentrum wurde wiederum - zum vierten Mal in Folge - als hervorragender Ausbildungsbetrieb ausgezeichnet. Der Grund: auch 2003 schloss eine Auszubildende des FZR die Berufsausbildung als Berufsbeste mit dem Prädikat sehr gut ab. Claudia Neißer war die landesbeste Auszubildende ihres Jahrgangs zum Beruf Physikalaborant/in. Die wiederholten Auszeichnungen für herausragende Leistungen in der dualen Berufsausbildung durch die Industrie- und Handelskammer Dresden sind für den Kaufmännischen Direktor des FZR kein Zufall. „Exzellente Wissenschaft braucht Unterstützung von qualifizierten Technikern und guten Administratoren. Nur wenn alle Positionen mit gut ausgebildetem und motiviertem Personal besetzt sind, gelingt das erforderliche Zusammenspiel im Team. Dabei ist das Bemühen des FZR um eigenen hervorragenden Nachwuchs eine notwendige Investition in die Zukunftsfähigkeit. Schön, wenn dieses Bemühen solche Früchte trägt.“ Im Jahr 2003 bildete das FZR 27 Auszubildende in 10 Ausbildungsberufen aus.

# Wissen- schaf(f)t Zukunft



## Tag der offenen Tür

auf dem Forschungs- und  
Technologiestandort Rossendorf

**Tanz der Elemente**  
 im Rahmen des Jahres der Physik 2003  
 24. - 28. Juni 2003



Das Forschungszentrum Rossendorf engagierte sich bei der zentralen Veranstaltung in Dresden, die im Jahr der Physik 2003 von der Deutschen Physikalischen Gesellschaft, von Wissenschaft im Dialog und vor Ort in Dresden vom Leibniz-Institut für Festkörper- und Werkstoffforschung organisiert wurde. Unter dem Titel „Tanz der Elemente“ stellte das FZR in den eigens aufgebauten Zelten auf der Prager Straße (der Dresdener Fußgängerzone) das größte Ausstellerteam. In einem separaten Ausstellungszelt wurde an fünf Ständen das Thema natürliche Radioaktivität präsentiert, wobei die Rossendorfer Nebelkammer zu einem regelrechten Publikumsmagneten avancierte.

Im großen Ausstellungszelt demonstrierte Prof. Wolfhard Möller die Physik von Musikinstrumenten an liebevoll ausgearbeiteten Plakaten und Ausstellungsstücken. Jugendliche konnten sich davon überzeugen, dass Musik des bekannten Rappers „Eminem“ eigentlich nur Krach ist, wohingegen von einer Pauke oder einer Geige echte Musik produziert wird. Die Koordination und Organisation der Ausstellungen des FZR wurde vom Bereich Öffentlichkeitsarbeit wahrgenommen. Prof. Möller trat im Übrigen mit dem Thema Musik und Physik auch auf der Bühne bei der gut besuchten Eröffnungsshow im Kulturpalast auf. Der publikumswirksame „Tanz der Elemente“ in Dresden verzeichnete mit mehr als 32.000 Besuchern einen neuen Rekord in dieser Veranstaltungsreihe. Die insgesamt rund dreißig beteiligten Wissenschaftler und Mitarbeiter des FZR hatten die schöne Möglichkeit, eine Woche lang große wie kleine Besucher alters- und situationsgerecht mit den für sie relevanten Forschungsthemen zu erreichen. Die Resonanz war deshalb sowohl bei den Besuchern als auch bei den Ausstellern durchweg enthusiastisch.

**Tag der offenen Tür**



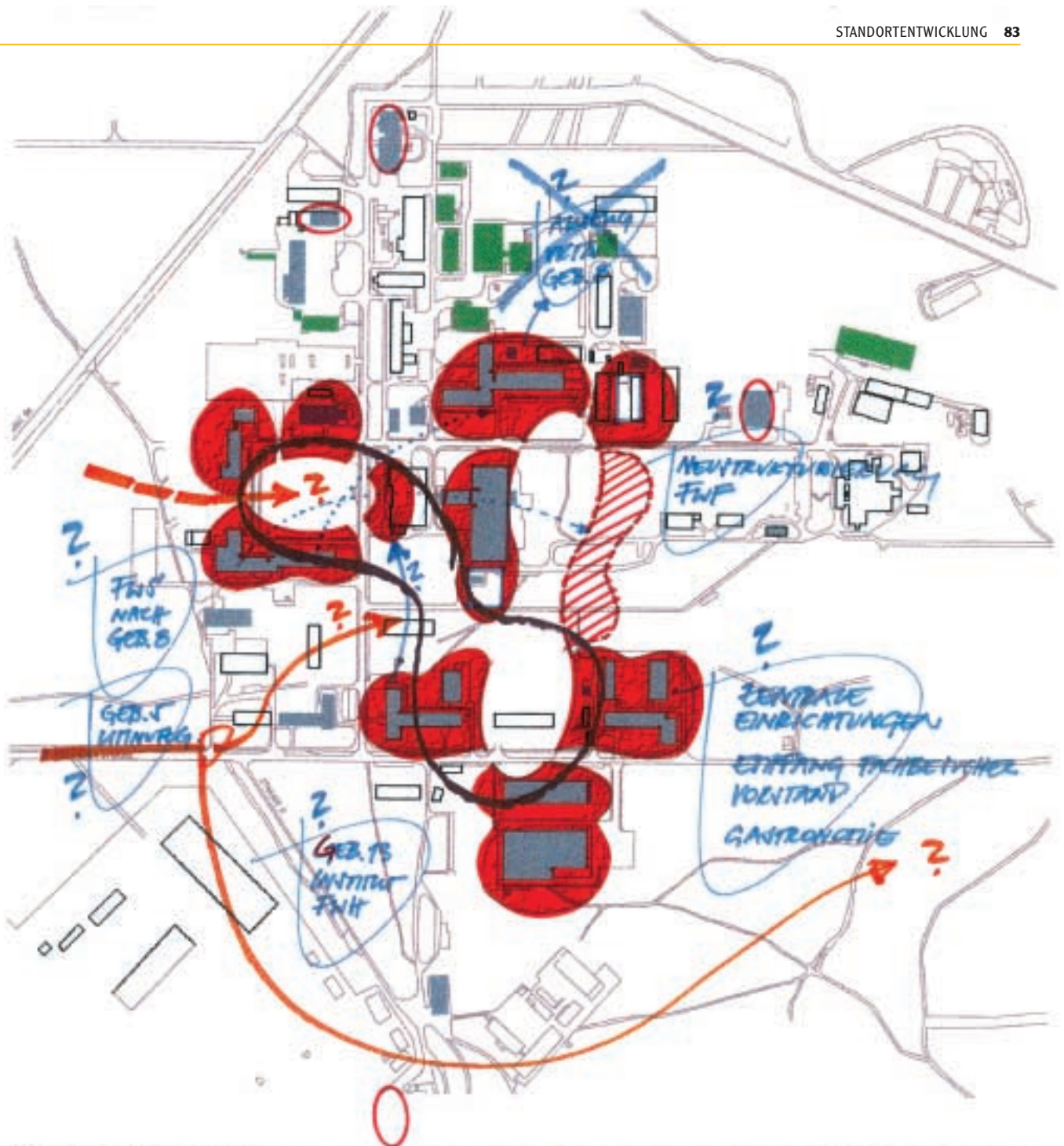
Am 27. September 2003 nahmen mehr als 1.800 Besucher die Gelegenheit wahr, den Forschungsstandort Rossendorf zu erkunden, sich über die aktuellen Forschungsprogramme des FZR zu informieren sowie Labors und Großgeräte zu besichtigen.

Erstmals wurde der Tag der offenen Tür in Kooperation mit dem Verein für Kernverfahrenstechnik und Analytik (VKTA) und dem Rossendorfer Technologiezentrum (ROTECH) durchgeführt. Besucher konnten somit einerseits den im Rückbau befindlichen Forschungsreaktor (VKTA) besichtigen, andererseits einen Streifzug durch das größte Forschungsgerät Sachsens, den supraleitenden Elektronenbeschleuniger ELBE (FZR), unternehmen sowie innovative Firmengründungen bei ROTECH kennen lernen.

## Perspektive und Entwicklung des Forschungsstandortes Rossendorf

Peter Joehnk

Mein Vorstandskollege Prof. Johannsen formulierte zu seinem Amtsantritt im Frühjahr 2003 die Überschrift „Das FZR in Bewegung“. Zutreffender kann man die Situation kaum beschreiben. Was für die fachliche Profilierung gilt, bedarf der Begleitung durch instrumentelle Untersetzungen. Und hier ist mit der Verfeinerung der betriebswirtschaftlichen Steuerungsinstrumente und der Einführung der Kosten- und Leistungsrechnung in 2003 ein wichtiger Beitrag geleistet worden. Das parallel dazu entwickelte Controlling macht aber auch deutlich, wo noch Handlungsbedarf gegeben ist: Die Standortkosten in Rossendorf sind uns zu hoch. So sind z. B. die Strom- und Wärmeversorgungspreise am Standort in den vergangenen Jahren exorbitant gestiegen; ein Ausgleich durch höhere Mittelzuweisungen durch die Zuwendungsgeber war aufgrund der bekannten Haushaltssituation nicht zu erwirken, so dass diese Steigerungen letztendlich zu Lasten der wissenschaftlichen Arbeitsmöglichkeiten gehen. In dieser Situation sind deutliche Verbesserungen nur durch fundamentale Veränderungen erreichbar. Daher wurde der in 2002 eingeleitete Prozess der Standortbefassung weiter dynamisiert. Was am Forschungsstandort Rossendorf historisch gewachsen und aus seiner ehemaligen Aufgabenstellung heraus begründbar war, wirkt sich heute für den Standort als Nachteil aus: Die lockere, weitestgehend flache Bebauung des Standortes in Form einer Streusiedlung steht einer wirtschaftlich optimierten Betriebsführung entgegen. Größere Einsparungsschritte sind daher nur durch Kompaktierung und Reduzierung der insgesamt zu betreuenden Flächen zu erreichen. Voraussetzung für die Durchführung dieser Maßnahmen ist eine strategische Entwicklungsplanung für den Standort, in der neben wirtschaftlichen Aspekten Betriebs-, Versorgungs- und Entwicklungsszenarien mit einfließen müssen. Die Grundlage hierfür ist ein Masterplan, der durch seine allumfassende und langfristig orientierte Betrachtungsweise sichert, dass bei der operativen Umsetzung einzelner Maßnahmen die strategischen Entwicklungsziele nicht außer Sicht geraten. Zur Vorbereitung eines solchen Masterplanes fand ein intensiver Diskussionsprozess innerhalb des FZR und am Standort statt, der angereichert war durch fünf Studentenarbeiten mit Überlegungen zur landschaftsarchitektonischen Standortentwicklung. Diese Arbeiten sind unter Leitung von Prof. Kokenge von der Technischen Universität Dresden entstanden und haben mit ihrem mutigen und visionären Blick auf den Standort viele wichtige Hinweise geliefert. Hierfür danke ich nochmals im Namen des FZR und schließe zugleich Prof. Niels Fritsche von der Fakultät für Architektur der TU Dresden für seine freundschaftliche Beratung mit ein. Mit Dresdner Planungsbüros wurde sodann eine Konzeptstudie für einen Masterplan entwickelt, die als Grundlage für die Ausschreibung der Generalplanung des Forschungsstandortes Rossendorf Verwendung fand. Zur Sicherung der Qualität der laufenden Sanierungs- und Neubauprojekte wurde parallel dazu ein „Rossendorfer Standard“ für zukünftige Planungs- und Bauvorhaben entwickelt. Dieser Standard wird dazu beitragen, dem Standort eine angemessene qualitative und gestalterische Ausstattung zu sichern. Im Rahmen eines



ENTWICKLUNGSBENARI  
DIREKTIONSGRUNDLAGE 5.2.04

## FZR - FORTFÜHRUNG MASTERPLAN

HENNACH FERTIG

europaweiten Ausschreibungsverfahren haben sich namhafte Planungsbüros um die Aufgaben am Forschungsstandort beworben. Im Ergebnis konnte das international renommierte Büro HENN für die Generalplanung in Rossendorf gewonnen werden. In einem zentrumsweiten Programming wurde in der Diskussion mit den Wissenschaftlern herausgefiltert, welche Zusammenarbeitsbeziehungen bestehen und sich zukünftig entwickeln werden, und wie diese eine bauliche Entsprechung haben könnten. Die sich hieraus abbildenden Schwerpunkte sind Grundlage für die weitere Planung zur baulichen Zusammenführung der Institute des FZR. In seiner Herbstsitzung 2003 hat das Kuratorium die bisher erarbeiteten Analysen und Konzepte zur Standortentwicklung zustimmend zur Kenntnis genommen und den Vorstand damit beauftragt, die dazu notwendigen Arbeiten zügig umzusetzen. Wir sind in Bewegung - und die Richtung stimmt!

## Daten und Fakten

### Organe und Gremien | Überblick

#### Organe und Gremien

Das Forschungszentrum Rossendorf (FZR) wurde am 06.12.1991 als gemeinnütziger, eingetragener Verein gegründet. Es wird als Einrichtung der „Leibniz-Gemeinschaft“ zu je 50 % von der Bundesrepublik Deutschland und den Ländern, insbesondere dem Freistaat Sachsen, getragen.

#### Mitgliederversammlung

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

##### Mitglieder:

Staatssekretär Dr. Frank Schmidt	Veit Rinkel
Dr. Peter Joehnk	Dr. Josef Scholz
Prof. Dr. Frank Pobell	Prof. Dr. Gert Bernhard
Prof. Dr. Dr. h. c. Wolf Häfele	Dr. Frank Gabriel
Dr. Hanno Grünberg	

#### Kuratorium

Das Kuratorium ist das umfassende Aufsichtsorgan. Es entscheidet in den grundsätzlichen Angelegenheiten des Vereins und bestimmt die Richtlinien seiner Aufgabenstellung. Das Kuratorium überwacht die Einhaltung der satzungsgemäßen Aufgaben und kontrolliert insoweit die Tätigkeit des Vorstands. Im Kuratorium verfügen das Land und der Bund jeweils über drei Stimmen; weiterhin gehören ihm ein von der Mitgliederversammlung gewähltes Mitglied des Vereins sowie ein vom Vorstand vorgeschlagener und von der Mitgliederversammlung zu wählender Sachverständiger an. Den Vorsitz führt ein Vertreter des Landes, stellvertretender Vorsitzender ist ein Vertreter des Bundes. Der Vorstand des Vereins und der Vorsitzende des Wissenschaftlichen Beirats nehmen mit beratender Stimme und der Vorsitzende des Wissenschaftlich-Technischen Rates als weiterer Gast an den Sitzungen des Kuratoriums teil.

##### Das Kuratorium besteht am Ende des Berichtszeitraums aus folgenden Mitgliedern:

Staatssekretär Dr. Frank Schmidt (Vorsitzender)	Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
RD Dr. Jan Grapentin (Stellvertreter)	Bundesministerium für Bildung und Forschung
MR Dr. Reinhard Zimmermann	Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
Dr. Frank Gabriel	Forschungszentrum Rossendorf
Prof. Dr. Peter Fulde	Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme

**Vorstand****Der Vorstand des FZR setzt sich wie folgt zusammen:**

Prof. Dr. Bernd Johannsen	Wissenschaftlicher Direktor (Sprecher des Vereins)
Dr. Peter Joehnk	Kaufmännischer Direktor

**Wissenschaftlicher Beirat**

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

**Dem Wissenschaftlichen Beirat gehören folgende Mitglieder an:**

Prof. Dr. Axel Kleemann (Vorsitzender), Hanau  
 Prof. Dr. Hartmut Backe (Stellvertreter), Mainz  
 Prof. Dr. Ulrich M. Gösele, Halle  
 Prof. Dr. Jens Volker Kratz, Mainz  
 Dr. Jörg Hadermann, Villigen/Schweiz  
 Prof. Dr. Gerd Folkers, Zürich/Schweiz  
 Dr. Peter Fritz, Karlsruhe  
 Prof. Dr. Werner Mäntele, Frankfurt  
 Prof. Dr. Hans Henrik Andersen, Kopenhagen/Dänemark  
 Prof. Dr. Willem Vaalburg, Groningen/Niederlande

**Beiräte für Großgeräte des  
 Forschungszentrums Rossendorf**  
 • **Beirat des PET-Zentrums**

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

**Diesem Beirat gehören folgende Mitglieder an:**

Prof. Dr. U. Haberkorn, Heidelberg	Prof. Dr. A. Schubiger (Sprecher), Villigen/Schweiz
Prof. Dr. T. Kuwert, Erlangen	Prof. Dr. W. Vaalburg, Groningen/Niederlande

• **MAC/SAC für die  
 Strahlungsquelle ELBE**

Seit Fertigstellung des Gebäudes hat das **Machine Advisory Committee (MAC)** den Aufbau des Elektronenbeschleunigers fachlich begleitet.

**Mitglieder MAC:**

Dr. H.-D. Gräf, Darmstadt	Prof. Dr. D. Husmann (Sprecher), Bonn
Dr. K.-H. Kaiser, Mainz	Dr. A.F.G. van der Meer, Rijnhuizen/Niederlande
Dr. H. Weise, Hamburg	

Die Abschlussitzung fand am 3. April 2003 statt.

Nach weitgehendem Abschluss der Aufbauphase und Übergang zu den wissenschaftlichen Experimenten wurde am 04.04.2003 das **Scientific Advisory Committee (SAC)** für die Strahlungsquelle ELBE gegründet.

- **STAC für das Hochfeldlabor Dresden**

**Dem SAC gehören folgende Mitglieder an:**

Prof. Dr. H. Backe, Mainz	Prof. Dr. T. Elsässer (Sprecher), Berlin
Prof. Dr. K.-P. Hofmann, Berlin	Prof. Dr. D. Frankenberg, Göttingen
Prof. Dr. U. Kneißl, Stuttgart	Dr. A. F. G. van der Meer, Nieuwegein/Niederlande

Das **Scientific Technical Advisory Committee (STAC)** für das Hochfeldlabor Dresden wurde im Oktober 2003 gegründet.

**Diesem Beirat gehören folgende Mitglieder an:**

Dr. P. Frings, Toulouse/Frankreich	Prof. Dr. R. Grössinger, Wien/Österreich
Prof. Dr. F. Herlach, Leuven/Belgien	Dr. H. Jones, Oxford/Großbritannien
Prof. Dr. B. Lüthi, Zürich/Schweiz	Prof. Dr. J. K. Maan, Nijmegen/Niederlande
Prof. Dr. H. J. Schneider-Muntau, Tallahassee/USA	

## Interne Gremien

- **Wissenschaftlich-Technischer Rat**

Durch den Wissenschaftlich-Technischen Rat stellt der Vorstand eine angemessene Beteiligung der wissenschaftlichen und technischen Mitarbeiter an der Erarbeitung der wissenschaftlichen und technischen Programme sicher.

Dem Wissenschaftlich-Technischen Rat gehören die Direktoren der wissenschaftlichen Institute, Leiter zentraler eigenständiger wissenschaftlich-technischer Abteilungen und gewählte Vertreter der wissenschaftlich-technischen Mitarbeiter des Forschungszentrums an.

**Zum Ende des Berichtszeitraums gehörten folgende Mitglieder dem WTR an:**

Prof. Dr. Eckart Grosse (Vors.)	Dr. Wolfgang Enghardt (Stellv.)
Prof. Dr. Gert Bernhard	Prof. Dr. Manfred Helm
Prof. Dr. Wolfhard Möller	Prof. Dr. Frank-Peter Weiß
Dr. Hartmut Spies	Dr. Frank Gabriel
Dr. Peter Michel	Dr. Ralf Bergmann
Dr. Gunter Gerbeth	Dr. Gerhard Geipel
Dr. Andreas Kolitsch	

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

- **Betriebsrat**

**Der Betriebsrat des Forschungszentrums Rossendorf setzt sich wie folgt zusammen:**

Siegfried Dienel (Vors.)	Jörg Voigtländer (stellv. Vors.)
Joachim Gollert	Christel Schneiderei
Monika Bulenda	Sabine Pförtner
Dr. Harald Curian	Steffen Schaller
Christian Damm	Bernd Hartmann
Dr. Rudi Wunsch	



## Überblick

<b>Name:</b>	FORSCHUNGSZENTRUM ROSSENDORF e.V.
<b>Träger:</b>	Freistaat Sachsen, Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft und Kunst
<b>Finanzierung:</b>	Grundfinanzierung: 50 % Länder, insbesondere Freistaat Sachsen, 50 % Bundesrepublik Deutschland
<b>Planstellen:</b>	403,5 (Stichtag 31.12.2003)
<b>Drittmittelstellen:</b>	97 (Personenjahre)
<b>Doktoranden:</b>	43
<b>Grundfinanzierung:</b>	49.188T€
<b>Sondermittel:</b>	159T€
<b>Drittmittel:</b>	8.001T€

Die fünf Institute bilden den wissenschaftlichen Kern des Forschungszentrums, die durch die Zentralabteilungen fachübergreifend bei der Lösung wissenschaftlich-technischer Probleme unterstützt werden. Die Planung und Durchführung großer institutsübergreifender wissenschaftlicher Projekte wird in den Projektgruppen verwirklicht, die aus den Instituten und Abteilungen gebildet werden.

### Wissenschaftliche Institute: **Institut für Ionenstrahlphysik und Materialforschung**

Direktoren: Prof. Dr. Wolfhard Möller    Tel.: +49 351 260-2245    E-mail: w.moeller@fz-rossendorf.de  
 Prof. Dr. Manfred Helm    Tel.: +49 351 260-2260    E-mail: m.helm@fz-rossendorf.de

### **Institut für Bioorganische und Radiopharmazeutische Chemie**

Direktor: Prof. Dr. Bernd Johannsen (bis 28.02.2003)  
 Tel.: +49 351 260-3170    E-mail: b.johannsen@fz-rossendorf.de

Direktor: Dr. Hartmut Spies (kommissarisch ab 01.03.2003)  
 Tel.: + 49 351 260-3170    E-mail: h.spies@fz-rossendorf.de

### **Institut für Radiochemie**

Direktor: Prof. Dr. Frank-Peter Weiß (kommissarisch bis 31.10.2003)  
 Tel.: +49 351 260-3480    E-mail: f.p.weiss@fz-rossendorf.de

Direktor: Prof. Dr. Gert Bernhard (ab 01.11.2003)  
 Tel.: +49 351 260-3210    E-mail: g.bernhard@fz-rossendorf.de

### **Institut für Sicherheitsforschung**

Direktor: Prof. Dr. Frank-Peter Weiß    Tel.: +49 351 260-3480    E-mail: f.p.weiss@fz-rossendorf.de

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

Direktor: Prof. Dr. Eckart Grosse    Tel.: +49 351 260-2270    E-mail: e.grosse@fz-rossendorf.de

### Zentralabteilungen: **Forschungs- und Informationstechnik**

Leiter: Dr. Frank Gabriel    Tel.: +49 351 260-3109    E-mail: f.gabriel@fz-rossendorf.de

### **Strahlungsquelle ELBE**

Leiter: Dr. Peter Michel    Tel.: +49 351 260-3259    E-mail: p.michel@fz-rossendorf.de

### Projektgruppen:

#### **ELBE-Quelle**

Leiter: Dr. Frank Gabriel    Tel.: +49 351 260-3109    E-mail: f.gabriel@fz-rossendorf.de

#### **ESRF-Beam-Line ROBL**

Leiter: Dr. Norbert Schell    Tel.: +33 476 88 2367    E-mail: schell@esrf.fr

#### **Hochfeldlabor**

Leiter: Prof. Dr. Frank Pobell    Tel.: +49 351 260-3344    E-mail: f.pobell@fz-rossendorf.de

<b>Patente:</b>	Erfindungsmeldungen:	14
	Patentanmeldungen national:	17
	Patentanmeldungen international:	11
	Patenterteilungen national:	8
	Patenterteilungen international:	4

## Organigramm

