

Introduction

With the FRJ-2 research reactor and the ELLA external neutron guide laboratory, the Research Centre Jülich (FZJ) was operating a powerful neutron source with a special priority in the field of cold neutrons. At a thermal power of 23 MW, the FRJ-2 reached a maximum thermal neutron flux of 2.9×10^{14} neutrons/cm²s (undisturbed) in the heavy water moderator. The liquid hydrogen cold source is located close to the reactor's flux maximum and three neutron guides supplied the instruments at the ELLA external neutron guide laboratory with cold neutrons of 3–15 Å wavelength. The reactor and its instruments were open to scientists from Germany, Europe and across the globe for the benefit of their scientific research goals. The FZJ gratefully acknowledges complementary funding support from the EU that helped to fulfil our goals, namely providing large-scale research equipment for a wide range of scientific applications in the university and non-university sector far beyond the Research Centre itself. On May 2nd, 2006 the reactor was shut down. Some of our best instruments are being relocated to the new research reactor FRM-II in Munich. Because of the short running time in 2006 this report combines the results of the years 2005 and 2006.

The total number of reactor operation days was 189 in 2005 and 69 in the four months operation in 2006. In total, 387 individual experiments were completed in 2005 and 2006. Taking into account the longer reporting period, this is still a 16 % rise in comparison to the performance of 2004, when 249 experiments were done. External proposals made up for about 50 % of the experiments. Fig. 1 shows the number chart of the experiments per instrument. Concerning the number of experiments the small-angle scattering machines KWS-1 and -2 clearly stand out. This is mostly due to the fact that SANS experiments are usually shorter. In contrast to 2004 both SANS machines were available with equal performance. This led to an increase of their use by 54 % (adjusted to operation time) showing that there is a clear demand for two such machines by the user community.

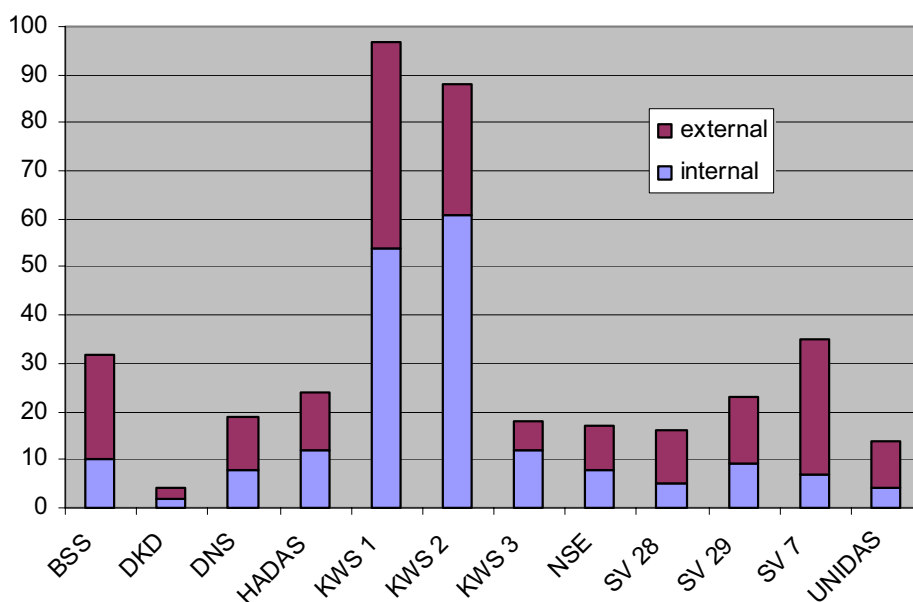


Figure 1: Experiments performed in the year 2005 and 2006 on the neutron scattering instruments at FRJ-2

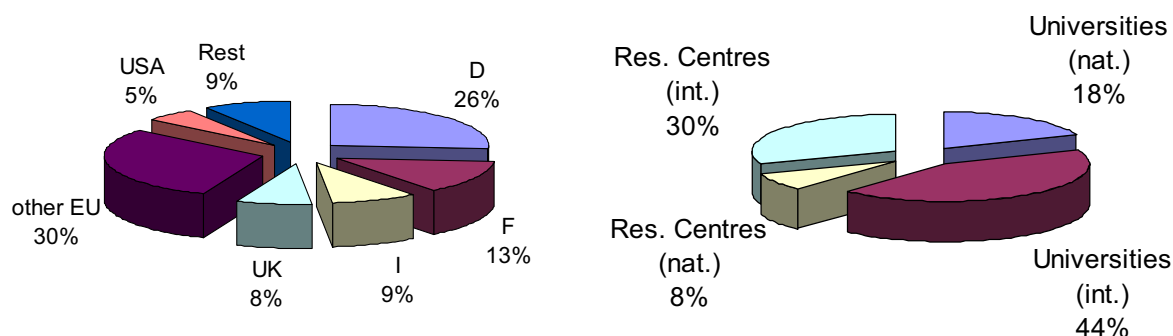


Figure 2: Geographical pattern of FRJ-2 user groups and type of their home institution in the years 2005 and 2006

Fig. 2 shows the geographical and institutional distribution of the user groups visiting Jülich. 22 countries were represented in 2005 and 2006, five more than in the year before. Notably, for the first time researchers from Asia (China, Taiwan and Korea) and South/Middle America (Mexico and Uruguay) used the facility. Although the absolute numbers of German institutions remained unchanged their share decreased due to the strongly increased number of non-German European proposers. Among those France, Italy and the United Kingdom were particularly active. The largest number of experimental groups is from universities and its share has increase further from 54 % in 2004 to 62 %. This stresses the importance of the FRJ-2 facility in the academic community and across the European landscape of neutron sources.

The largest share of the experiments was on soft matter systems as in the last years. Nonetheless, structural investigations of hard matter and magnetism are well represented, too.

Since the beginning of the 6th Framework Programme of the EU the European user programme “Jülich Neutrons for Europe” became an activity of NMI3, the Integrated Infrastructure Initiative for Neutron Scattering and Muon Spectroscopy. Proposals accepted under the programme benefit from funding by the European Commission (travel expenses for users). Although the number of beam days requested under this programme decreased to 515 (from 802 in 2004) this still corresponds to an overload factor of more than four compared to the contractual beam time. In order to cope with this situation more time was given as required by the programme (209 days instead of 156). Nevertheless, the selection had to be very strict and many scientifically qualified proposals had to be turned down just because of lack of beam time. In addition to the EU programme, the existing support for German university users was continued.

Last but not least, in autumn 2005 and spring 2006 the 9th and 10th International Neutron Laboratory Course took place in Jülich¹. These training courses for students were now supported by the NMI3 as the successor of the European Neutron Round Table. As in the year before, the number of students was limited to 55. There were more than double as many applications in both years so that there had to be a strict selection. About half of the accepted students came from foreign countries. Remarkably, for the course in 2006 for the first time in the history of the lab course the number of female participants exceeded that of male students.

¹ Because of the shutdown of the reactor the 10th lab course had to be preponed from its usual autumn date to spring. In this way the continuity of the annual lab course could be preserved because the 11th installation will be held in autumn 2007 using the instruments after their relocation to FRM-II in Munich.

After the start-up of the new FRM-II reactor in Munich, there were four medium flux reactors in Germany: the FRM-II in Garching, FRJ-2 in Jülich, FRG-1 in Geesthacht and BER-II in Berlin. Despite the request from the European user community, the German federal government will only support the operation of two German neutron sources in the long term: FRM-II as the most modern research reactor and BER-II with its specialisation in extreme sample environment, in particular high magnetic fields. Therefore, it had been decided to concentrate the German neutron scattering activities by relocating the best Jülich instruments to Munich and on the other hand permanently shutting-down FRJ-2 on May 2nd, 2006. This closing of a major European facility will have a significant impact on European research activities with neutrons just at a time, when in the USA and Japan new MW spallation sources are starting-up. The former facility, SNS at Oak Ridge, started production of the first neutrons just a few days before the shut-down of FRJ-2.

But does this imply the end of neutron research in Jülich? Not at all!

Jülich is determined to remain a leading centre of research with neutrons even without its own source. The “Jülich Centre for Neutron Science” — founded February 16th, 2006 with an inauguration attended by some 260 scientists from all over the world — comprises the operation of instruments at external sources, instrument development and in-house research. The instrument activities will take place at three geographical locations: Munich/Germany, Oak Ridge/USA, and Grenoble/France.

With the Technical University of Munich TUM, a collaboration agreement was signed in June 2004. With joined forces of TUM and FZJ FRM-II will be the leading German user facility and one of the leading centres for research with neutrons world-wide. An outstation of FZJ with its own personnel housed in a dedicated building is currently being established at FRM-II (JCNS-FRMII).

Some of the best Jülich instruments are currently upgraded and relocated to FRM-II: the SANS machines KWS-1, KWS-2, KWS-3, the cold and thermal TOF-spectrometers DNS and TOPAS (an upgrade of SV-29), the spin echo instrument NSE, a reflectometer (MARIA) with polarisation analysis based on HADAS, and finally SPHERES, a backscattering spectrometer with phase space transformer which is currently being built by FZJ with funding from the federal government for Munich. While 1/3 of the beam time on these instruments will be reserved for in-house research, 2/3 will be allocated to external users through a proposal system.

At SNS (Oak Ridge, USA) we are building a beyond-state-of-the-art neutron spin echo instrument with unprecedented resolution in the μ s spin-echo time regime with 6 orders of magnitude in dynamical range. This instrument will open access to the first MW spallation source for German users.

The operation of instruments at Institut Laue-Langevin (Grenoble, France), namely the triple-axis spectrometers IN12 and IN22, the NSE spectrometer IN15, and the single-crystal diffractometer D23 will also be maintained in this context.

To conclude: while the FRJ-2 as an important neutron source in Europe was shut down, Jülich will remain a major centre for research with neutrons due to its dedicated commitment at FRM-II, SNS and ILL.

Because since 2005 the operation of the neutron scattering facility FRJ-2 is part of the research programme “Large Scale Facilities for Research with Photons, Neutrons and Ions”

(PNI) of the Helmholtz Association, this report has a different structure than the preceding reports: As the first part this document contains the PNI report in German language and reports on the main instrumental achievements under this programme. The second part comprises the experimental reports from experiments carried out at FRJ-2 in the years 2005/2006 and publications of the past five years that are related to FRJ-2 experiments. The reports are grouped by instrument² and preceded by a tabular description of the instrument parameters. Detailed descriptions of the instruments can be found in the instrument handbook “Neutron Scattering Experiments at the Research Reactor in Jülich” or the web site www.neutronsattering.de.

Reiner Zorn

² The SANS proposals are labelled by the instrument they originally applied for. Some experiments were transferred between KWS-1 and KWS-2 because of better feasibility or availability. For experiments involving combinations of instruments often only single reports were submitted. These are then listed under the instrument which is considered the most important for the objective. The instruments β -NMR, SV-30, EKN, LAP-ND are not represented here because they are under construction, only used for test purposes, or not demanded during 2005/6. Nevertheless, their specifications can be found in the instruments handbook and on the web site.

Programmanteil „Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen“

Forschungsbereich „Struktur der Materie“

Koordinator: Prof. A. Wagner, DESY

Programm „Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen“

Sprecher: Prof. M. Steiner, HMI

FZJ- Ansprechpartner für den Programmanteil:

Prof. Th. Brückel, IFF

A Ziele und Einbettung in den Forschungsbereich

Im Forschungsbereich Struktur der Materie kommen eine Vielzahl von Großgeräten zum Einsatz, die Forschungsmöglichkeiten mit Photonen, Neutronen und Ionen für eine breite Palette von Wissenschaftsdisziplinen, angefangen von Physik, Chemie, Biologie und Geowissenschaften, bis hin zu Materialwissenschaften, Ingenieurwissenschaften und Umweltforschung bieten. Der größte Teil der an diesen Großgeräten verfügbaren Strahlzeit wird externen Nutzern zur Verfügung gestellt, die hauptsächlich von Universitäten, aber auch von außeruniversitären Forschungseinrichtungen und der Industrie kommen.

Das Forschungszentrum Jülich FZJ ist im Bereich der Forschung mit Neutronen aktiv. Dabei resultiert die spezielle Rolle Jülichs innerhalb der deutschen Neutronenlandschaft aus:

- einer leistungsstarken Eigenforschung auf dem Gebiet kondensierter Materie mit Schwerpunkten im Bereich weicher Materie und im Magnetismus;
- einem Nutzerbetrieb, der in diesen wissenschaftlichen Schwerpunktsbereichen Unterstützung durch Experten und Laboreinrichtungen bietet;
- einem wissenschaftsmotivierten Methoden- und Instrumententwicklungsprogramm;
- der Nutzung der zukunftsweisenden Möglichkeiten der Neutronenforschung an gepulsten MW- Spallationsquellen.

Die Jülicher Arbeiten sind in das Helmholtz-Programm „Großgeräteforschung mit Photonen, Neutronen und Ionen“ PNI eingebunden, das formal im Jahr 2005 begonnen hat. Forschung mit Neutronen ist zugleich ein Grundpfeiler des Programms "Kondensierte Materie" und liefert wichtige Beiträge auch in anderen Programmen, z. B. "Informationstechnologie mit nanoelektronischen Systemen".

B Programmergebnisse

Erreichte Meilensteine und/oder herausragende wissenschaftliche Ergebnisse

Die an den Neutroneninstrumenten des FZJ durchgeführte Eigenforschung ist wesentlicher Bestandteil des HGF- Programms "Kondensierte Materie", siehe den entsprechenden Fortschrittsbericht. Schwerpunkte liegen in den Themenbereichen "Elektronische und magnetische Phänomene" und "Weiche Materie und Biophysik". Die strategische gegenseitige Verzahnung der beiden Programme „Kondensierte Materie“ und „PNI“ führt zu einer von der Wissenschaft getriebenen Methoden- und Instrumententwicklung. Dadurch werden auch neue Möglichkeiten für andere HGF- Programme bereitgestellt, etwa für das Programm "Informationstechnik mit nanoelektronischen Systemen" in dem Forschungsbereich "Schlüsseltechnologien".

Der Reaktor einschließlich seiner kalten Neutronenquelle erreichte in 2005 eine Verfügbarkeit von 98,9 %. Damit nimmt der FRJ-2 im Zuverlässigkeitsvergleich einen internationalen

Spitzenplatz ein. Insgesamt wurden 257 Neutronenstreuexperimente an 17 Instrumenten durchgeführt. Die Nachfrage nach Strahlzeit durch die europäischen Nutzer im Rahmen des EU- geförderten "NMI3 Access Programme" war mit einer Überbuchungsquote von 4.4 relativ zur vertraglich vereinbarten Messzeit weiterhin sehr hoch, was die Attraktivität Jülichs auf internationalem Niveau belegt. Europäische Nutzer kamen hauptsächlich aus Frankreich, Spanien, Großbritannien, Italien, Belgien und den Niederlanden.

Im Jahr 2005 wurden innerhalb des Instrument-Entwicklungsprogramms folgende Ziele erreicht:

Auflösungsverbesserung für NSE Spektrometer: Neuartige Korrekturspulen, so genannte Fresnelspulen wurden entwickelt, die eine wesentliche Steigerung der Auflösung von Spinechospektrometern erlauben. Erste Tests am Jülicher Spinechospektrometer ergaben eine Auflösungsverbesserung um annähernd einen Faktor 2. An dem Spektrometer, das für die SNS gebaut wird, können damit in Zukunft auch extrem langsame Bewegungen großer Makromoleküle bis in das Zeitfenster von 1 Microsekunde verfolgt werden.

Fertigstellung des RückstreuSpektrometers SPHERE: Im Rahmen der Verbundforschung wurde in den letzten Jahren am FRM-II ein RückstreuSpektrometer aufgebaut. Das Instrument zeichnet sich durch innovative Elemente, wie einen Phasenraumtransformator und einen Dopplerantrieb mit Linearmotor aus. In 2005 konnten alle wesentlichen Elemente des Instruments aufgebaut werden, so dass in 2006 die Inbetriebnahme erfolgen kann.

Inbetriebnahme des thermischen DreiachsSpektrometers SV30: In den vergangenen Jahren wurde das in die Jahre gekommene Instrument SV4 durch ein thermisches Dreiachsinstrument neuester Bauart (SV-30) ersetzt. Dieses Instrument wurde speziell für die Polarisationsanalyse mit Hilfe von Heliumfilterzellen entwickelt. Die Polarisation des Heliumgases wird mit zwei verschiedenen Techniken erreicht, die beide in Jülich entwickelt werden: das optische Pumpen metastabil angeregter Atome und das optische Pumpen über den Spinaustauschprozeß. Das Spektrometer ist ausgerüstet mit zwei großen doppelt fokusierenden Monochromatoren. Der Neutronenfluß an der Probe ist fast eine Größenordnung höher als der des alten Instruments. Nachdem das Instrument in 2004 fertig gestellt wurde, konnte es in 2005 endgültig in Betrieb genommen werden. Verschiedene Experimente zur Phononenspektroskopie und zur Bestimmung magnetischer Anregungen in korrelierten Elektronensystemen wurden durchgeführt.

Vollständige Vektorpolarisationsanalyse: Eine neuartige, extrem effiziente Methode für die vollständige Vektorpolarisationsanalyse in der Neutronenstreuung wurde am FZJ entwickelt. Im vergangenen Jahr konnten verschiedene Demonstrationsexperimente an komplexen magnetischen Materialien mit der neuen Methode erfolgreich durchgeführt werden. Zum ersten Mal ist es möglich, die volle Polarisationsmatrix für alle zugänglichen Energie- und Impulsüberträge zu bestimmen. Die neue Methode ermöglicht die vollständige Vektorpolarisationsanalyse auch an einem Multidetektor- und Flugzeitinstrument und ist deshalb von besonderem Interesse für Spallationsneutronenquellen. Die Methode erlaubt es, komplexe magnetische Strukturen mit chiralen Komponenten zu lösen und ermöglicht die experimentelle Trennung von Korrelationen zwischen kern- und magnetischen Freiheitsgraden in Festkörpern.

Larmor Kodierung: Im Rahmen des EU- Projekts „Polarized Neutron Techniques“ wurden neuartige Möglichkeiten zur Kodierung von Richtung oder Geschwindigkeit von Neutronen mit Hilfe des Neutronenspins erforscht. Ein Beispiel ist die Kodierung mit Hilfe von rotierenden Magnetfeldern, die eine einfache Möglichkeit zur Auflösungsverbesserung von Dreiachs- oder Flugzeitspektrometern verspricht.

Fokussierende Kleinwinkelanlage KWS-3: Die Kleinwinkelanlage KWS-3 ist ein weltweit einmaliges Instrument, welches mit Hilfe eines fokussierenden Spiegels eine Eintrittsblende auf den Detektor abbildet. Mit dieser Anlage kann eine Auflösung erzielt werden, die eine

Größenordnung über derjenigen konventioneller Lochblendeninstrumente liegt. In 2005 wurden erste Tests mit einem zusätzlichen Replikaspiegel durchgeführt, der prinzipiell eine Intensitätserhöhung um einen Faktor 2 zulässt. Simulationen haben gezeigt, dass das Instrument durch den geplanten Umzug nach München und der damit verbundenen Endposition an einem Neutronenleiter annähernd zwei Größenordnungen an Fluss gewinnen wird, was völlig neue Anwendungsbereiche erschließen kann.

Programmübergreifende Themen (Vernetzung, Nachwuchs, Chancengleichheit)

Forschung mit Neutronen am Forschungszentrum Jülich ist sehr gut eingebunden in nationale und internationale Netzwerke. Die Errichtung der Außenstelle des FZJ am Forschungsreaktor FRM-II der TUM und die Durchführung des Neutronenpraktikums zusammen mit mehreren NRW Universitäten sind besonders gelungene Beispiele für die Vernetzung des FZJ mit universitären Einrichtungen. Nutzerexperimente europäischer Nutzer werden durch das EU FP6 Access Programm unterstützt. Jülich ist außerdem Koordinator des EU-Exzellenznetzwerks "Soft Matter Composites" (SoftComp), das in 2004 gegründet wurde und in dem 19 akademische Institute und 5 Industriefirmen aus mehreren europäischen Ländern im Bereich der Erforschung weicher Materie zusammen arbeiten. Als Beispiel für eine Vernetzung auf dem Gebiet der Methodenentwicklung sei das größte der gemeinsamen Forschungsnetzwerke für Neutronenstreuung innerhalb des EU FP6 Programms erwähnt. Dieses Netzwerk ist der Entwicklung von fortschrittlichen Larmorpräzessionstechniken für Neutronenstreuung gewidmet. Das Forschungszentrum Jülich koordiniert diese Forschung über "Neutronenpolarisationstechniken" PNT, die insgesamt 20 internationale Partner und Beobachter zusammenbringt. Daneben ist das FZJ an weiteren europäischen Netzwerken beteiligt, wie etwa DETNI zur Detektorentwicklung, NSF zur Entwicklung von Neutronenpolarisationsfiltern oder EURISOL zum Transport- und Aktivierungsverhalten von Hochenergieneutronen. Auf nationaler Ebene arbeitet das „Komitee für Forschung mit Neutronen“ (KFN) zusammen mit Nutzern und den Zentrenvertretern, um eine nationale Strategie im Bereich der Neutronenstreuung zu entwickeln und die politischen Entscheidungsträger zu beraten. Ein Wissenschaftler des Forschungszentrums hat in den Jahren 2003 bis 2005 den Vorsitz dieser gewählten Vertretung der Neutronennutzer geführt.

Am FRJ-2 werden wesentliche Drittmittelerträge durch ^{99}Mo Produktion – als Vorstufe des wichtigen Radiopharmazeutikums ^{99}Tc – erlöst.

Nachwuchsförderung im Bereich von Großgeräten ist eine Kernaufgabe der HGF Zentren. Vom 12. - 23. September 2005 wurde am FZJ zum neunten Mal die jährliche Neutronenschule abgehalten. Dieses Praktikum ist bei weitem die größte Schule dieser Art in Deutschland und eine der größten weltweit. Sie besteht aus einer Woche Vorlesung und einer Woche Experimente an 11 Neutronenstreuinstrumenten. Die Vorlesungsmanuskripte werden in Buchform verlegt. Die Schule wird in Zusammenarbeit mit der RWTH Aachen und den Universitäten in Münster, Köln und Bonn durchgeführt.

Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben (Additional Funding)

In Oak-Ridge, USA, wird als erste Neutronenquelle der nächsten Generation eine MW Spallationsquelle, die SNS, realisiert. FZJ beteiligt sich an der Instrumentierung dieser Quelle durch den Bau eines Spin-Echo Spektrometers, welches das Beste seiner Art werden wird. Durch diesen Beitrag zur Instrumentierung erhalten deutsche Nutzer Zugang zur SNS und deutsche Wissenschaftler können Erfahrung mit der Instrumentierung einer solchen neuartigen Quelle sammeln. In 2005 konnte die Entwicklung aller wesentlichen Komponenten des Spektrometers weitgehend abgeschlossen werden. Neben den supraleitenden Magneten mussten insbesondere neue „Fresnel“- Korrekturspulen entworfen werden, die es dem

geplanten Spektrometer an der SNS ermöglichen sollen, zu bisher unerreichten Fourierzeiten von 1 Microsekunde (entsprechend der weltbesten Energieauflösung von 0.7 neV) vorzustoßen. Diese Spulen wurden im existierenden Jülicher Spin Echo Instrument erfolgreich getestet. Damit kann nun der Übergang aus der Konstruktions- in die Bauphase des SNS Instruments erfolgen.

Stand der Umsetzung der Senatsempfehlungen

Auflage: *Aufbauend auf einem übergreifenden Helmholtz-Konzept, sollten FZJ und GKSS eine intensive Beteiligung einschließlich des Transfers von Personal und Instrumentierungen am FRMII starten. Ein Konzept hierfür sollte bis Ende 2004 vorgelegt werden.*

Am 30. Juni 2004 wurde die Eckpunktevereinbarung zur Einrichtung einer Außenstelle des FZJ am neuen Forschungsreaktor FRM-II der TUM unterzeichnet. Die Umsetzung ist in vollem Gange: (i) Ein Gebäude für die Außenstelle ist im Bau und soll im November 2006 fertig gestellt werden; (ii) FZJ hat zusätzliches Personal für den Betrieb der Außenstelle eingestellt; (iii) Die notwendigen Infrastrukturmaßnahmen am FRM-II, wie Medienversorgung, Bau der Neutronenleiter etc. werden durchgeführt; (iii) insgesamt 8 Neutronenstreulinstrumente des FZJ werden für den Betrieb in München vorbereitet.

Auflage: *FZJ sollte dem Stilllegungsplan für DIDO für 2006 folgen.*

Der DIDO Reaktor als die leistungsstärkste Neutronenquelle der HGF wird im Jahre 2006 noch für 84 Tage betrieben und dann am 1. Mai endgültig außer Betrieb genommen. Die Antragsunterlagen für die Stilllegungsgenehmigung sowie die Planung für den anschließenden Rückbau der Anlage sind in Arbeit.

Empfehlung: *Die Entwicklung des Spin-Echo-Instruments durch das FZJ, das am SNS in Oak Ridge eingesetzt werden soll, wird dringend unterstützt.*

Die Verhandlungen mit den amerikanischen Partnern sind weit gediehen und haben am 16. Februar 2006 zur Unterzeichnung eines Zusammenarbeitsvertrags geführt. Zum Stand der technisch- methodischen Arbeiten siehe Punkt „Ergebnisse der Überzeichnungsvorhaben“.

C Weitere Programmentwicklung

Aufgrund der 2004 durch den Aufsichtsrat des Forschungszentrums getroffenen Entscheidung, den Reaktor FRJ-2 im Jahr 2006 stillzulegen und eine Außenstelle auf dem FRM-II Gelände zu errichten, müssen große Teile des Jülicher Anteils an dem Programm geändert werden. Nach der Außerbetriebnahme des DIDO Reaktors wird das FZJ seine Aktivitäten auf dem Gebiet der Forschung mit Neutronen auf externe Quellen verlagern. Explizit sind dies der weltweit leistungsfähigste Forschungsreaktor am Institut- Laue Langevin ILL in Grenoble / Frankreich, die modernste kontinuierliche Neutronenquelle FRM-II bei München und die erste Megawatt Spallationsquelle SNS in Oak Ridge / USA. Im „Jülich Centre for Neutron Science“ wird der Nutzerbetrieb an den FZJ- eigenen Instrumenten an diesen Quellen, die Instrument- und Methodenentwicklung, sowie die Eigenforschung des FZJ im Bereich der Neutronenstreuung zusammengefasst werden.

Methodenentwicklung wird an allen Instrumenten konsequent weitergeführt. Das Spinechoinstrument an der SNS soll 2008 in Betrieb gehen – siehe die Beschreibung des Überzeichnungsprojekts. Das Dreiachsspektrometer IN12 am ILL wird in 2006 eine neue Multianalysatoroption „UFO“ erhalten. Den Schwerpunkt der Instrumententwicklung werden jedoch diejenigen Instrumente bilden, die nach München transferiert und dort an dem FRM-II betrieben werden sollen. Im Jahr 2004 wurde ein Eckpunktepapier zwischen dem Forschungszentrum Jülich und der Technischen Universität München (TUM) unterzeichnet, wel-

ches den Betrieb von 8 Instrumenten am FRM-II durch ein Team von Wissenschaftlern und Technikern des Forschungszentrums vorsieht. Im Einzelnen:

Hochauflösendes Rückstreu-spektrometer (SPHERE): Dieses Instrument wurde durch das Forschungszentrum Jülich mit der finanziellen Förderung durch das BMBF im Rahmen der Verbundforschung für den FRM-II Reaktor errichtet. Das Instrument zeichnet sich durch innovative Komponenten aus, wie den Phasenraumtransformations- Chopper und einem schnellen Dopplerantrieb. Die Phase der Inbetriebnahme beginnt Anfang 2006, gefolgt vom regulären Nutzerbetrieb.

Neutronenspinechospektrometer (NSE): Dieses Instrument wird als erstes vom FRJ-2 zum FRM-II transferiert werden. Das Instrument hat den Nutzerbetrieb am FRJ-2 bereits im letzten Zyklus 2005 eingestellt und wird momentan umgebaut. Es soll Ende 2006 am FRM-II betriebsbereit sein. Aufgrund der optimalen Position am Ende eines Neutronenleiters wird ein merklicher Gewinn, sowohl in Intensität als auch in Auflösung, erwartet. Durch neue Fresnelkorrekturspulen kann die Auflösung weiter verbessert werden. Die Instrumentansteuerungs- und Datenaufnahme- Hard- und Software werden vollständig erneuert.

Spektrometer für diffuse Neutronenstreuung (DNS): Für dieses Instrument werden wesentliche Änderungen an Abschirmung, Monochromator und Detektorbank erforderlich. Diese Umbauarbeiten werden sofort nach Außerbetriebnahme des FRJ-2 beginnen. Die Zählraten für die Polarisationsanalyse werden durch eine zweite Detektor- und Analysatorbank verbessert werden. Der zugängliche Raumwinkel wird durch linear ortsauflösende Heliumzählrohre wesentlich vergrößert und die Energieauflösung durch einen schnell drehenden Chopper neuester Bauart verbessert. Erste Tests mit Neutronen am FRM-II sind für Ende 2006 / Anfang 2007 vorgesehen.

Kleinwinkelstreuinstrumente (KWS-1, KWS-2): Beide Instrumente sind Lochblenden-Neutronenkameras neuester Bauart mit einem 20 m langen Detektorflugrohr. Beide sollen direkt nach Außerbetriebnahme des FRJ-2 an den FRM-II transferiert werden. In München wird eines der beiden Instrumente ausgelegt für Experimente mit höchster Intensität (20 % Geschwindigkeitsselektor). Das andere Instrument wird optimiert für hohe relative Impulsraumauflösung mit einem einstellbaren Choppersystem. Es wird eine Option für Kleinwinkelstreuung unter streifendem Einfall erhalten und mit Neutronenpolarisationsanalyse ausgerüstet werden. Beide Instrumente werden Neutronenlinsen erhalten, um Zählraten und Auflösung zu verbessern. Während eines der beiden Instrumente bereits Ende 2006 betriebsbereit aufgebaut sein soll, wird das zweite Instrument in 2007 folgen.

Fokussierende Kleinwinkelanlage KWS-3: Diese weltweit einmalige Anlage setzt einen fokussierenden Spiegel ein, um eine Eintrittsblende auf den Detektor abzubilden. Damit wird eine Auflösung erzielt, die etwa eine Größenordnung besser ist, als bei den Lochblendeninstrumenten. Da das Instrument von einer Neutronenweiche am FRJ-2 an eine echte Neutronenleiterendposition am FRM-II transferiert werden wird, erwarten wir eine Intensitätserhöhung von fast zwei Größenordnungen. Auch dieses Instrument soll Ende 2006 am FRM-II betriebsbereit sein.

Reflektometer für magnetische Nanostrukturen (MARIA): Ein Instrument für Neutronenstreuung unter streifendem Einfall, welches auf dem existierenden HADAS-Reflektometer des FRJ-2 basiert, wird am FRM-II aufgebaut werden. Das Instrument wird für Polarisationsanalyse der diffusen Streuung über einen großen Winkelbereich ausgelegt werden. Es wird in zwei verschiedenen Betriebsmoden arbeiten können: als ein Reflektometer mit vertikaler Fokussierung und als Kleinwinkelinstrument zur Streuung unter streifendem Einfall mit einem kollimierten einfallenden Strahl. Das Instrument wird optimiert für die Untersuchung magnetisch dünner Filme bis herab in den Monolagenbereich und zur Untersuchung von lateral strukturierten magnetischen Nanostrukturen und soll auf diesem Gebiet eine weltweite Spitzenstellung einnehmen.

Thermisches Flugzeitspektrometer mit Polarisationsanalyse TOPAS: Dieses Instrument basiert auf dem existierenden SV-29 Spektrometer des FRJ-2. Es wird ausgelegt für einen

mittleren Bereich von Energieüberträgen bis zu etwa 110 meV, wo Instrumente an kontinuierlichen Quellen aufgrund der höheren Repetitionsrate gut mit Instrumenten an Spallationsneutronenquellen konkurrieren können. Das Instrument wird für die Untersuchung von magnetischen Anregungen optimiert. Es wird eine Option zur Polarisationsanalyse erhalten, die auf Heliumfilterzellen basiert. Dadurch wird es möglich werden, magnetische und Gitteranregungen in korrelierten Elektronensystemen zu trennen.

- Publikationen und Patente sind im Internet nachlesbar unter: www.fz-juelich.de/FB-2005
- Ein Abkürzungsverzeichnis befindet sich in Kapitel A.6

A.1.1.1 Großgerät FRJ-2

Leistungskategorie II

Forschungsbereich „Struktur der Materie“

Programm „Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen“

Koordinator: Prof. Dr. A. Wagner, DESY

Sprecher: Prof. Dr. M. Steiner, HMI

FZJ-Ansprechpartner:

Prof. Dr. T. Brückel, IFF

Einsatz des Großgeräts

Der FRJ-2 ist nach dem FRM-II die mit Abstand leistungsstärkste Neutronenquelle in Deutschland und eine der leistungsfähigsten Mittelflussquellen im internationalen Vergleich. Einschließlich seiner kalten Quelle und mit seiner hochmodernen Instrumentierung steht der FRJ-2 sowohl Helmholtz-internen als auch externen Wissenschaftlern als leistungsfähiges Großgerät zur Neutronenstreuung zur Verfügung. Neben der Neutronenstreuung wird der FRJ-2 als einer von vier europäischen Forschungsreaktoren und als einziger in Deutschland zur Produktion von Mo-99 im industriellen Maßstab genutzt. Mo-99 ist das Ausgangsprodukt für die Herstellung des in der Medizin nicht mehr verzichtbaren Radiopharmakums Tc-99.

Analyse der Zielerreichung

Wesentliche Ziele zur Weiterentwicklung des FRJ-2 im Jahr 2005 waren die Erhöhung der passiven Sicherheit des Reaktors durch Ertüchtigungen im Bereich der Notstromversorgung und die Installation neuer Pegelstandsgeber und eines neuen Prozessleitsystems für die Beckenanlage.

Planung des Berichtsjahres:

Im Betriebsplan des FRJ-2 wurden für 2005 insgesamt 189 Betriebstage geplant. Gemäß der vertraglichen Vereinbarung zur Mo-99-Produktion war eine Bestrahlung von 160 Targets zur Produktion des Isotops Mo-99 zu erwarten.

Planerreichung des Berichtsjahres:

Der Reaktor einschließlich seiner kalten Neutronenquelle wurde in 2005 an 187 Tagen im Leistungsbetrieb gefahren und erreichte damit eine Verfügbarkeit von 98,9 %, bezogen auf die geplante Betriebszeit. Damit nimmt der FRJ-2 auch im Zuverlässigkeitsvergleich 2005 einen internationalen Spitzenplatz ein. Die durchgeführten Modernisierungen konnten im Rahmen des geplanten Budgets abgewickelt werden. Ungeplante budgetrelevante Ertüchtigungsmaßnahmen wurden 2005 nicht erforderlich.

Die Nachfrage nach Strahlzeit durch die europäischen Nutzer im Rahmen des EU- geförderten "NMI3 Access Programme" war weiterhin sehr hoch, was die Attraktivität Jülichs auf internationalem Niveau belegt. Insgesamt wurden innerhalb dieses Programms 515 Instrumentetage nachgefragt. Dies übersteigt die vertragliche Verpflichtung von 117 Instrumenttagen pro Jahr um das 4.4-fache. Um zumindest diejenigen Messzeitanträge zum Zuge kommen zu lassen, die eine ausgezeichnete Beurteilung durch das international besetzte Strahlzeitkomitee erhielten, wurde die Messzeitvergabe im EU-Programm auf 209 Tage erhöht. Es mussten trotzdem immer noch 60 % aller Anträge aus Mangel an Messzeit zurückgewiesen werden.

Insgesamt wurden 257 Neutronenstreuexperimente an 17 Instrumenten durchgeführt. Die institutionelle Zugehörigkeit dieser Nutzergruppen ergibt sich wie folgt (in jedem Fall ist nur

die Anzahl von unterschiedlichen Gruppen angegeben, wobei natürlich einige Gruppen – insbesondere von nationalen Einrichtungen - mehrere Experimente am FRJ-2 ausgeführt haben): 14 Gruppen von deutschen Universitäten, 36 Gruppen von ausländischen Universitäten, 6 Gruppen von nationalen Forschungszentren und 23 Gruppen von internationalen Forschungszentren. Europäische Nutzer kamen hauptsächlich aus Frankreich, Spanien, Großbritannien, Italien, Belgien und den Niederlanden.

Maßgebliche Abweichungen:

Der Verlust von 2 Betriebstagen im Vergleich zu den für 2005 geplanten 189 Betriebstagen wurde verursacht durch zwei unplanmäßige automatische Reaktorabschaltungen durch Ausfälle im Bereich der Thermoelemente der Brennelementdifferenztemperaturüberwachung. Diese Ausfälle sind bedingt durch die genehmigte Bauart der Brennelemente und auch durch die neue Brennelementdifferenztemperaturüberwachung nicht vollständig zu verhindern, da in jedes Brennelement nur ein einziges Thermoelement eingesetzt werden kann und in diesem Bereich somit auch durch die in 2004 durchgeführten Ertüchtigungsmaßnahmen keine Redundanz aufgebaut werden konnte.

Weiterhin erfreulich entwickelte sich die Produktion von Mo-99. Nicht zuletzt wegen der hohen Anlagenverfügbarkeit konnten in den drei Bestrahlungseinschüben statt der vertraglich vereinbarten 160 Targets insgesamt 174 Targets bestrahlt und an den Kunden ausgeliefert werden.

Besondere Vorkommnisse:

Im Jahr 2005 kam es zu insgesamt 6 unplanmäßigen automatischen Reaktorabschaltungen auf Grund verschiedener Ursachen. Lediglich in 2 Fällen konnte der Reaktor nicht unmittelbar wieder angefahren werden, sondern es musste nach Behebung der jeweiligen Störung das Abklingen der Xenon-Vergiftung abgewartet werden, um den Reaktor wieder auf Nennleistung anfahren zu können. In den anderen Fällen wurde der Reaktor unmittelbar nach Beseitigung der Störung wieder angefahren.

Es sind hierbei keine Erkenntnisse aufgetreten, die den Einsatz von finanziellen Mitteln oberhalb des geplanten Budgets zukünftig erwarten lassen würden.

Gesamteinschätzung der Entwicklung und Vorausschau

Entsprechend dem Beschluss des FZJ- Aufsichtsrates wird der FRJ-2 im Mai 2006 endgültig außer Betrieb genommen. Für den restlichen Betrieb sind in 2006 84 Betriebstage geplant. Es ist davon auszugehen, dass die sehr hohe Verfügbarkeit und Terminzuverlässigkeit der Anlage bis zuletzt auf dem erreichten Niveau gehalten werden kann.

Die vorbereitenden Maßnahmen zur Außerbetriebnahme des FRJ-2, Erstellung der für die Stilllegungsgenehmigung erforderlichen Antragsunterlagen und zur Planung des anschließenden Rückbaus der Anlage wurden vom Betreiber, der Zentralabteilung Forschungsreaktoren des Forschungszentrums Jülich, bereits begonnen.

Larmor labelling by spin flippers with rotating magnetic field

A. Ioffe

Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Festkörperforschung, 52425 Jülich, Germany

The neutron spin-echo (NSE) method, which is the most powerful tool of high-resolution neutron spectroscopy, is known in two versions: either with the long solenoids or short alternating fields. Here we consider an alternative version that makes use of spin flippers with an in-plane rotating magnetic field vector. Some possible applications of such technique are discussed. This approach can be considered as an alternative to the present-day NSE techniques.

Neutron inelastic scattering provides extremely valuable information about the atomic collective motions with the microscopic length scale from the nearest neighbor distances to a few nanometers and the time scale that ranges from characteristic microscopic times as picoseconds up to microseconds in the case of slow motions as e.g. critical fluctuations in phase transitions, dynamic behavior of disordered systems (structural and spin glasses), etc. The change in neutron energy, ΔE , corresponding to these slow motions is extremely small (in the order of 1 neV) and requires extremely high energy resolution methods. Conventional methods of inelastic spectroscopy, time-of-flight or triple-axis, are relying on a differential approach, when the energy exchange is determined as the difference of two well-defined energies of incident and scattered neutrons. Therefore, any attempt to reach a very high, better than $\Delta E/E=10^{-4}$, energy resolution by conventional neutron

precession with the Larmor frequency $\omega_L = \gamma_n B$ (γ_n - the gyromagnetic ratio). The total precession angle φ_L , is defined by this frequency and the time τ of propagation of the neutron through the magnetic field region of length L :

$$\varphi_L = \omega_L \tau = \frac{\gamma_n}{v_n \cdot \cos(\psi)} \int_L B dl \quad (1)$$

where ψ is the inclination of the neutron trajectory and v_n is the neutron velocity along it.

In this case, the orientation of the neutron spin can be considered as the arrow of a “Larmor clock” that is attached to every neutron. Indeed, the “time” shown by the clock is defined by the field integral (Eq. (1)) seen by each neutron. Such a Larmor labelling opens the unique possibility for the development of “unusual” neutron scattering techniques, where the energy (momentum) resolution does not require

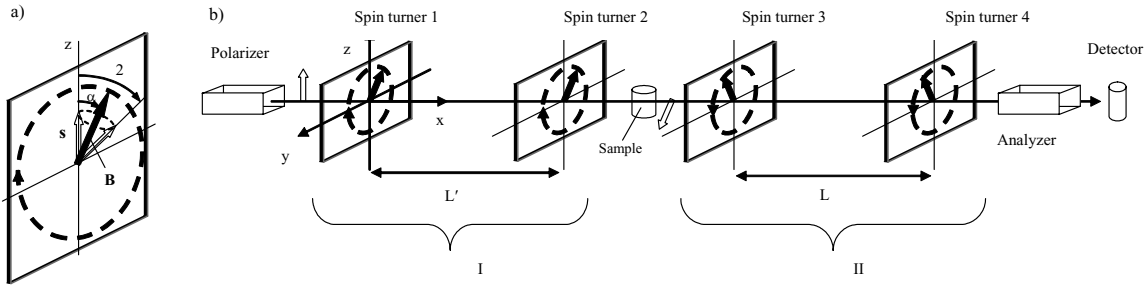


Figure 1. a) The spin flipper with rotating magnetic field (RMF). In-plane rotation of the neutron spin vector is achieved by the Larmor precession of neutron spin by angle π around the magnetic field vector $\mathbf{B}$. b) Layout of the NSE spectrometer built by two pairs of the RMF flippers

spectroscopy methods will require extremely high monochromatization of the incident beam thus resulting in intolerable intensity losses. Indeed, the studies of slow dynamical process required a new non-traditional approach, the so-called neutron spin-echo (NSE) technique [1]. It provides few orders of magnitude higher energy resolution than any other technique of inelastic (quasielastic) neutron scattering.

The NSE technique is based on the phenomenon of Larmor precession of the neutron spin in a transverse magnetic field. When the neutron propagates across a region of magnetic field of strength B , the neutron spin undergoes a

the initial and final states to be well selected.

At present there are two well developed practical realizations of NSE principle: generic NSE technique [1] and neutron resonance spin echo technique (NRSE) [2].

Recently, we proposed a new kind of NSE technique, which is based upon the use of thin magnetic spin flippers with an in-plane rotating magnetic field vector (RFNSE) [3]. The main element of such a NSE spectrometer is the spin turner that provides the in-plane rotation of the neutron spin vector with a constant angular velocity ω , so that the angle of neutron spin rotation will be proportional to time t (Fig. 1a). Practically it is achieved by the Larmor preces-

sion of neutron spin around the magnetic field vector B that rotates in the plane yz with the angular velocity ω_B . If the Larmor precession angle is π , then the neutron spin will be mirror- reflected relative to the field vector, thus rotating in the plane yz with the angular velocity $\omega = 2\omega_B$.

A pair of such spin turners separated by a field-free area of length L (cascade I in Fig. 1b) is acting like a Larmor clock that shows the time $\alpha = 2\omega_B T = 2\omega_B L / V_n$ of propagation of neutron with velocity V_n between the turners. This time depends both on the neutron velocity V_n and the length L of its trajectory between flippers, but not on the arrival time. Indeed, the neutron velocity is coded by the angle α , so that the beam polarization at the sample spectrometer is a sinusoidal function of the neutron wavelength λ , $P_z = \cos(2\omega h \lambda L / m_n)$ (here h is the Plank constant and m_n is the neutron mass). For a wide spectrum neutron illumination, the neutron beam at the sample is an overlap of such functions with different periods and is completely depolarized.

The NSE principle is to apply a decoding operation to such beam. This decoding operation is essentially the time inversion and is practically achieved either by the change of the field direction (generic NSE) or the change of the sense of the RF-fields rotation (NRSE). The suggested NSE spectrometer is in a way analogue to NRSE spectrometer, so that it contains cascade II (Fig. 1b) with the opposite sense of magnetic field vector rotation. Then the final orientation of the spin vector relative to z -axis is

$$\beta = 2\omega \left[\frac{L_1}{v_n} - \frac{L_2}{v_n + \Delta v_n} \right] \quad (2)$$

where Δv_n is the change of the neutron velocity at the sample. As it follows from Eq. (2), changing the distance between foils in the cascade II, one can change β in rather wide range, thus providing a sinusoidal modulation of the outgoing neutron beam, the so-called NSE signal.

This novel RFNSE technique can be applied in all cases, when the use of Larmor precession devices may result in an improvement either in energy or momentum resolution of neutron scattering instruments, particularly for an improvement in the resolution of triple-axis spectrometers [4]. In this case, the momentum resolution is defined by the triple-axis spectrometer, while the energy resolution is defined by the NSE setup and may be increased up to 1 μ eV without significant intensity loss.

Another application of the RFNSE technique is high resolution measurements of the neutron momentum transfer in small-angle scattering, diffraction and reflectometry [5]. In this case the Larmor precession is used to label the angle ψ rather than wavelength as in NSE spectroscopy (Eq. (1)) and, in complete analogy with the abovementioned, a high angular resolution can be obtained when using practically uncollimated incident neutron beams. If a sample is placed in the RFNSE spectrometer with tilted spin turners (Fig. 2), then scattering at the sample results in different path lengths between turners 3 and 4. The NSE signal is recorded by the

change of distance L_2 . Recalling that the effective field integral is $2\omega_B L'$, one may conclude that the recorded signal is a superposition of NSE signals of different frequencies resulting from different effective field integrals over the neutron trajectories. The scattering profile can be restored by the Fourier transform of the recorded intensity.

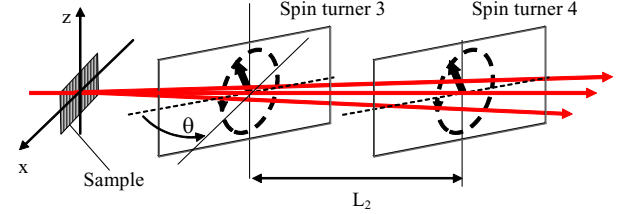


Figure 3. SERGIS configuration. F1- F4 are RMF flippers. Sample is scattering in xy plane, where there is no incident beam collimation

The result of Monte-Carlo simulations of a corresponding experiment is shown in Fig. 3. NSE signals corresponding to small beam deviations ψ in the plane ZX are well resolved in spite of the use of an only weakly collimated, $\pm 1^\circ$, incident neutron beam [6].

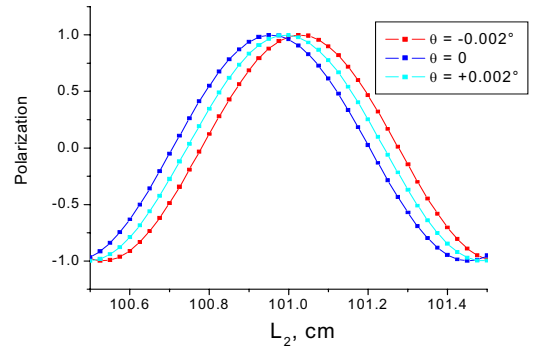


Figure 3. Shift of the NSE signal caused by the deviation of a practically uncollimated ($\pm 1^\circ$) neutron beam in ZX plane. RMF spin turners driving frequency of 50 kHz, $L_1 = 1$ m and $\theta_0 = 45^\circ$.

It is a pleasure to thank the VITESS team - S. Manoshin, K.Lieutenant and G. Zgismond for their permanent support.

- [1]. F. Mezei, Z.Physik 255, 146, 1972.
- [2]. R. Gähler, R. Golub, J. de Physique, C3-229, 45, 1984.
- [3]. A. Ioffe, Physica B 335 (2003) 169; A. Ioffe, Nucl. Instrum. Meth. A529, 2004, p. 39.
- [4]. Th.Keller et al. Physica B, 241-243 (1997) 101.
- [5]. M.Th. Rekveldt, Physica B, 234-236 (1997) 1135; J.Major et al., Physica B:336,(2003), 8.
- [6]. A. Ioffe, S. Manoshin. Nucl. Instrum. Meth. A529, 2004, p. 45.

The New Very Small Angle Neutron Scattering Instrument KWS-3

E. Kentzinger, A. Radulescu, J. Stellbrink, D. Richter and Th. Brückel

Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich

The newly built very small angle neutron scattering instrument KWS3 is the worldwide unique SANS instrument running on the focusing mirror principle. It allows performing scattering experiments with a wave vector transfer resolution between 10^{-4} and $10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$, bridging a gap between Bonse-Hart and pinhole cameras. This instrument will be transferred to FRMII, which should lead to an increase in wave vector transfer resolution by one order of magnitude and to an increase in flux by two orders of magnitude.

Ultra-small angle (U-SANS) and small angle neutron scattering (SANS) experiments are performed by two different types of instruments to cover a combined Q-range from $\approx 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$ up to $\approx 1 \text{ \AA}^{-1}$. Bonse-Hart cameras (Double Crystal diffractometers) are used for U-SANS experiments, whereas the “standard” SANS experiment is performed using a pinhole camera. In principle, the Q-range of both instrument classes overlaps. Typical U-SANS instruments like S18 (ILL), PCD (NIST) or DKD (FZJ) may reach maximum Q-vectors of $\approx 5 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$. The disadvantage of these instruments is that they do not allow taking a full area image on a 2D position sensitive detector. On the other hand, the well-known pinhole instrument D11 at Institut Laue-Langevin (France) reaches a minimum Q-vector of $5 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-1}$ by use of large wavelengths and sample-to-detector distances ($\approx 40 \text{ m}$). But the required instrumental setting pushes both types of instruments to its limits, mainly due to signal-to-noise level and the reduced flux at sample position.

Recently the use of neutron lenses as additional elements of a pinhole SANS instrument has been tested to overcome this intensity problem [1]. The design and concept of the KWS3 instrument at FZ Jülich (Germany) is even more advanced [2]. The principle of this instrument is a one-to-one image of an entrance aperture on a 2D position-sensitive detector by neutron reflection from a double-focusing elliptical mirror. To date, KWS-3 is the worldwide unique SANS instrument running on this principle. It permits to perform SANS studies with a scattering wave vector resolution between 10^{-4} and $10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ with considerable intensity advantages over conventional pinhole-SANS instruments. Therefore it perfectly bridges the “Q-gap” between U-SANS and SANS: Very Small Angle Scattering (V-SANS). The increasing need for these intermediate Q-vectors arises from the growing interest in biological and colloidal samples, which typically have characteristic length scales in the μm range. In this report we will give a short survey on the instrument concept and its actual realization and present some first results obtained from “real” samples. We will then detail the expected improvements related to the move of KWS-3 to FRMII.

A detailed description of the instrument has already been given in Ref. [2]. Figure 1 shows a sketch of the instrument. The main innovation and challenge in building this instrument was to build a large mirror having a shape

as close as possible to an ellipsoid and with a surface roughness less than $5 \text{ \AA}$ (rms). The mirror is a 1.2 m long, 0.1 m wide and 0.05 m thick toroidal double focusing Zerodur mirror of 11 m focal length, and coated with $1000 \text{ \AA}$ ^{65}Cu and $100 \text{ \AA}$ Al as a protection layer. At such a short mirror length with respect to the focal length, the toroidal shape is a good enough approximation to an elliptical shape. The reflection plane has been chosen to be horizontal, reducing the deterioration of the image due to gravity. The entrance pinhole is at one focus of the mirror, the other focus is in the detection plane of a 2D position-sensitive detector. The contrast ratio of the image on the detector was determined to be 10^{-4} .

Very recently a new elliptical mirror, built using the replica technology [3] has been installed concentrically to the toroidal mirror (Fig. 1). First tests with neutrons were performed which indicate that further improvements of the setup are required.

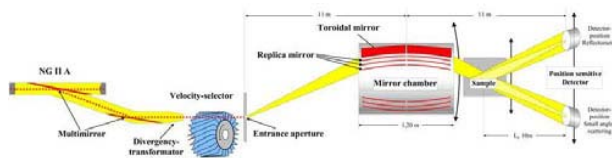


Figure 1 KWS3 experimental setup

At KWS3 the effect of multiple scattering requires special attention. An example of how this effect influences the evaluation of the geometrical and density parameters is presented in Figure 2. There the scattering patterns from a mixed solution of 1% PEB-7.5 random copolymer ($M_w=30\text{K}$) and 4% hexatriacontane paraffin in d-22 are shown for different sample thickness in polymer contrast. The inset of the figure shows the raw data together with the empty beam measurement. Comparison of the intensity in forward direction for the sample and empty beam provided a sample transmission of 10%, 20% and 70% in case of 2mm, 1mm and 0.2mm sample thickness, respectively. Multiple scattering is dominant in the case of the thickest sample while for the 0.2 mm sample thickness it is a minor contribution. Data analysis in terms of Beaucage model [4] revealed a significant variation of the power law behaviour and R_g with sample thickness. We can conclude that in order to have a reasonable sample transmission and to avoid

contribution from multiple scattering very thin samples are required. Recently we developed cells with large radius and variable thickness, covering the full cross section of the incoming beam. This allows to perform a systematic investigation of the multiple scattering effect as a function of cell thickness and thus to avoid misinterpretations. Another way to get the same result is to vary the sample contrast but, for certain samples, this is a much more difficult approach.

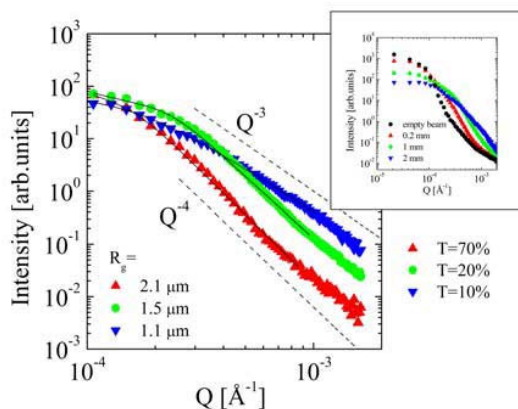


Figure 2 Scattering patterns from a mixed solution of 1% PEB-7.5 random copolymer (MW=30K) and 4% hexatriacontane paraffin in d-22 in polymer contrast. Results obtained for different sample thickness (as denoted by symbols explained within the inset together with the empty beam measurement) reveal how the multiple scattering influences the interpretation of the data.

We present in figure 3 the scattering pattern from a crystalline-amorphous poly(co-olefins) diblock copolymer in dilute solution over the whole Q range accessed by combining all three kinds of small-angle neutron scattering instruments in Jülich: The classical pin-hole instrument KWS2, the focusing-mirror KWS3 instrument and the double crystal diffractometer DKD [5]. The data allow a semi quantitative evaluation of structures of size scales between $10\text{\AA}$ and $10\text{ }\mu\text{m}$ and reveal the multilevel morphology of copolymer aggregates, being consistent with the microscope observations (up-right inset of figure 4). By the aggregating *s*PP and amorphous P(E-co-P) blocks at small scale a 2-d structure seems to be formed (Q^2 power law at larger Q). This structure evolves at intermediate scale into a rod-like structure (Q^{-1} power law at intermediate Q). The rods associate in bundles and the correlation effects between them result in the "shoulder"-like structure at around $Q^* \approx 3.5\text{--}4 \times 10^{-3} \text{ \AA}^{-1}$ (bottom-left inset of figure 3). At much larger scale (micrometer order) the rod bundles form network-like structures with mass fractal aspects (Q^{-3} power law) which associate in very large aggregates resembling snowflakes. The sharp intensity drop at around $7 \times 10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$

may reveal an additional contribution from the correlations between lateral branches of these aggregates over a characteristic length of about $10\text{ }\mu\text{m}$.

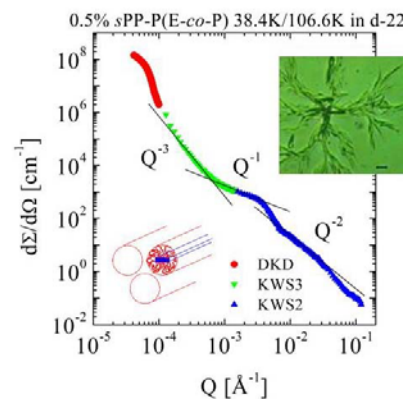


Figure 3 Scattering from a crystalline-amorphous diblock copolymer [4]. The lines indicate power law behaviour in different Q ranges. KWS2: conventional pin-hole SANS; KWS3: VSANS; DKD: Double Crystal diffractometer ("U-SANS").

In 2006, KWS3 will be transferred to the new FRMII reactor. A special cold neutron guide will be built, permitting an access to larger wavelengths, leading to an increase in the range of Q -resolutions down to $10^{-5} \text{ \AA}^{-1}$. Also, this transfer will result in an increase of the neutron flux at sample position by two orders of magnitudes, permitting the use of small material amounts, which is often the case with biological substances. This dramatic increase in flux will permit to optimally use the reflectometry mode of KWS-3. In this mode, performing SANS on thin film systems under grazing incidence (GISANS) will permit the access to in-plane correlation lengths around the μm , a length scale hardly accessible to off-specular scattering at a reflectometer or to GISANS at a pinhole camera. Also, the implementation of polarized neutrons and a polarization analysis covering the whole detector area will permit the investigation of magnetic correlations.

- [1] M.R. Eskilden et al., Nature, **391**, 563, 2000; S.-M. Choi et al., J. Appl. Cryst., **33**, 793 (2000)
- [2] B. Alefeld et al., Physica B, **283** 330 (2000), E. Kentzinger et al., Physica B **350** e779–e781 (2004)
- [3] <http://wave.xray.mpe.mpg.de/rosat/>
- [4] G. Beaucage and D.W. Schaefer, J.Non-Cryst.Solids **172-174**, 797 (1994)
- [5] A. Radulescu et al., Neutron News, **16-2**, 18 (2005)

High resolution neutron spin-echo spectroscopy facilities of JCNS: status of NSE at FRMII and the new NSE instrument at the SNS, ORNL

M. Ohl¹, O. Holderer¹, R. Schaetzler¹, T. Kozielowski¹, M. Monkenbusch¹, M. Butzek², U. Giessen², Ch. Tiemann², R. Achten², B. Laatsch², W. Westerhausen², H. Kleines³, M. Drochner³, P. Suxdorf³

¹ Institut für Neutronenstreuung

² ZAT, FZ-Jülich

³ ZEL, FZ-Jülich

Two ultra-high resolution spectrometers will be operated by the Jülich centre of neutron science JCNS. One at the FRMII reactor and the other at the new MW-spallation source SNS in Oak Ridge. The FRMII instrument emerges from the FRJ2-NSE. Fourier times beyond 200ns will be accessible at 13 Å wavelength. Also under construction is a “best-of-class” NSE instrument to be located at the MW spallation source in Oak Ridge. Using superconducting precession coils it shall cover the time range from 1ps to 1µs. A major development issue for both instruments is the development of a new generation of field integral correction elements necessary to achieve a sufficient resolution the high Fourier times.

The two neutron-spin echo spectrometers, the enhanced FRJ2-NSE that is currently being prepared to move to the FRMII in Munich and the newly build SNS-NSE spectrometer will supply the neutron user community with facilities of ultra high resolution spectroscopy. In terms of Fourier times (of the intermediate scattering function $S(Q,t)$) this means that the FRMII instrument will go beyond 200 ns and the “best-of-class” SNS-NSE will reach 1000 ns. Expressed as energy resolution this may be translated to resolutions of 3.5 respectively 0.7 neV. Utilizing a large available wavelength range a dynamical range of $1:10^5$ or $1:10^6$ respectively can be realized. The FRMII spectrometer shall become operational at the end of 2006. The SNS-NSE is planned for 2008. Besides the direct execution of NSE experiments the SNS installation will also serve as gateway to other neutron instruments (in particular backscattering and diffractometer) at this new and most powerful spallation source.

Technical improvements to be mentioned for the moving FRJ2-NSE consist of a modernization of the control electronics that is designed according to the Jülich-Munich standard based on the TACO experiment control. New mainly bipolar current sources replace the previous system to improve reliability and accuracy. Software and electronics layout work for the FRMII installation are also the template for the SNS spectrometer. Computer controllable mechanical adjustment stages have been developed for the positioning of the 3 radial field integral correction elements inside each of the two main solenoids. A nonmagnetic sample stage lift has been built that enables a 2-3 position vertical sample change to be performed by the control program.

A bend guide with polarizing FeSi-multilayer including guide magnetic field and Ni^{58} guide until the velocity selector position has already been installed by the FRMII department at their NL2. To achieve sufficient polarization at longer wavelength also an additional FeSi-polarizer at the entrance of the proper NSE spectrometer is foreseen. The special floor (Tanzboden) for the air cushions is currently being laid.

The SNS spectrometer is just moving from the pure design phase to the construction phase. A SNS beam line BL16 has been assigned and the instrument concept has been approved by the SNS. A number of beam

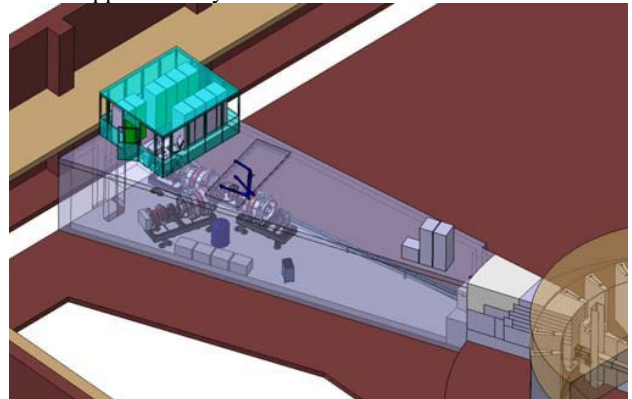


Figure 1 View of the planned SNS spectrometer in its magnetic shielding enclosure, which also serves as radiation shield. The moderator distance of the instrument can be changed by inserting optional neutron guide pieces. Shown is the outermost position which offers the highest possible scattering angle but also the smallest wavelength frame. A better neutron usage is achieved in the close position (the source/moderator is close to the bottom right edge of the picture).

transport and preparation devices have been ordered or are constructed at the FZJ. The neutron guide system, polarizing benders and choppers have been ordered. The parts of the secondary (the proper) spectrometer including a novel magnetic shielding enclosure are in the process of waiting for bids. Development of nonmagnetic, computer adjustable high precision mounting platforms (Hexapods) for the correction elements has been completed by the manufacturer.

The key technology needed to extend the NSE instrument resolution to the desired high Fourier times and keeping at the same time reasonably large solid angle for sample illumination and –in particular– scattered neutron detection consist in design and manufacturing of the field integral homogenizing correction elements. The problem consist in realization of a radial current density distribution that follows a given radial function $j(r)$ up to a high degree of

accuracy. At the outer radius the needed current density may reach 150A/mm and more. Which for the largest element this means that up to 800W dissipated heat must be removed such that the element stays at temperatures not higher than 60°C. Since the elements have to be placed into the beam path they must be transparent to neutrons. Whereas the biggest challenge is placed by the correction coils for the SNS spectrometer also the FRMII installation will benefit from the recent and coming improvements. The correction coil development has been supported by the TECHNI program and now by its successor in the EU NMI3 initiative.

After a model calculation which includes the full magnetic field of the “ideal” current density distribution of the chosen design proved that there are no principal physical effects that limit the correction efficiency a manufacturing scheme that enables the maintaining of the high mechanical accuracy of the numerically controlled machines up to the final stage has been devolved and tested. This scheme employing an Al-ground plate that is attached in two steps also enables effective heat extraction via heat conduction in the back plate, see fig 2.

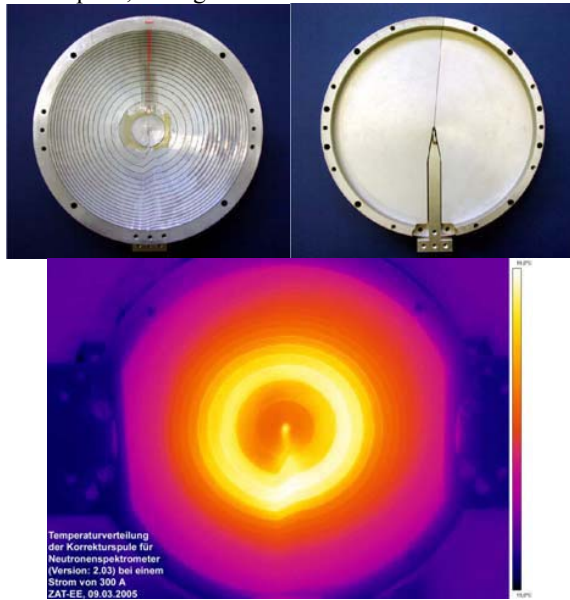


Figure 2 Front and back view of the large correction coil and temperature distribution on the front side with water cooling at the periphery at an operation current corresponding to 1μs Fourier time at the SNS spectrometer. The highest temperature is 55°C. The active diameter is 20cm.

To assess the function a full set of 3 pairs of correction coils with active diameters 10cm, 15cm and 20cm were computationally optimized to the parameters of the FRJ2-NSE which served in its last operation cycle before the move to Munich as test bed for these novel correctors. We still had not yet (a posterior) mechanical adjustments such that these degrees of freedom had to be approximately be taken into account by “current shifters” that belonged to the original installation of the spectrometer. After appropriate adjustments which corroborated the computed correction coil currents within 1-2% and optimizing the shifters the

measurement range could be extended from 22ns to 40ns at $\lambda = 8\text{\AA}$ (see fig. 3).

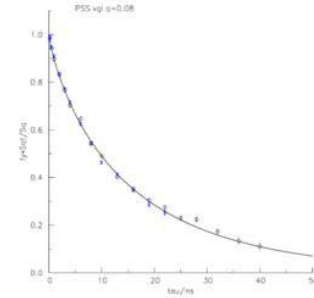


Figure 3 NSE Relaxation curve of a polymer solution in toluene, data extend up to 40ns.

However, phase maps over the large element close to the detector reveal the points that have to be addressed in a next step in order to achieve optimum performance. Figure 4 left side shows the variation of the echo-phase over the detector area (maps the cross section of the correction element) which is a measure for the field integral. The right side of the figure displays the resolution.

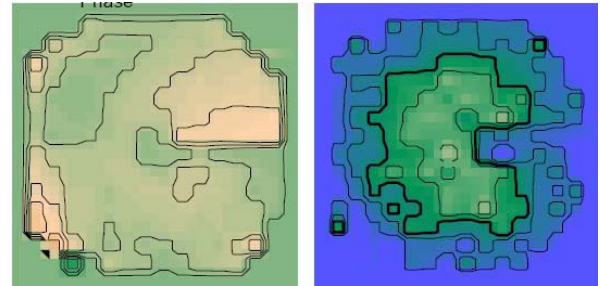


Figure 4 left: phase variation (isoline=45°). Right: resolution. Note the influence of the current finger at the right side!

The results indicate that 1. the influence of the current finger becomes disturbing at higher Fourier times but is locally restricted and 2. despite the very flat phase map the resolution is unexpectedly low. The latter effect has then been identified to be a consequence of the finite width of the cuts between concentric zones. This could be corroborated computationally and led to a modified cutting scheme that should remove the effect. The other consequence is that measures have to be devised to reduce the influence of the finger, i.e. reduction of the current by more cuts (now possible using the improved cutting scheme) and distributing the correction onto a “stack” of more than one coil.

Acknowledgement: Part of the correction coil development has been supported by the European Commission under the 6th Framework Programme through the Key Action: Strengthening the European Research Area, Research Infrastructures. Contract no: HII3-CT-2003-505925.

Commissioning of the Backscattering Spectrometer SPHERES

Peter Rottländer, Joachim Wuttke, and Wilhelm Bünten
Jülich Center for Neutron Science, FRM-II, 85747 Garching
and
Institut für Festkörperforschung, FZ Jülich, 52425 Jülich

Michael Prager and Dieter Richter
Institut für Festkörperforschung, FZ Jülich, 52425 Jülich

Hans Kämmerling and Heidi Straatmann
Zentralabteilung Technologie, FZ Jülich, 52425 Jülich

Matthias Drochner, Franz-Josef Kayser, Harald Kleines, and Frank Suxdorf
Zentralinstitut für Elektronik, FZ Jülich, 52425 Jülich

The backscattering spectrometer SPHERES (SPectrometer with High Energy RESolution) was initiated by the IFF (Institut für Festkörperforschung) as part of the starting instrumentation of FRM-II (original project name: RSSM) It is now the first instrument at the Garching site of the JCNS (Jülich Centre for Neutron Science).

In the course of the year 2005, all major components were assembled, and commissioning of the instrument started. Figure 1 shows the gas-tight instrument housing. Inside, the walls are covered with polyethylene and cadmium shielding.

Neutrons reach the instrument through a convergent guide that turned out to require additional shielding. Between the primary neutron guide NL6 and the instrument-specific convergent neutron guide, we have a temporary beam shutter and selector assembly which shall be improved in summer 2006 when another instrument will be inserted upstream in NL6.

A gold foil activation analysis has shown an integral neutron intensity of about $1 \cdot 10^{10}$ neutrons per second at the end of the convergent neutron guide, just in front of the chopper. The spatial distribution is reasonably



FIG. 1: The instrument housing.



FIG. 2: The chopper wheel.

homogeneous; the flux density is $1.8 \cdot 10^9$ /s/cm².

A central component of the spectrometer is the phase-space transformation (PST) chopper. The incoming beam is deflected by rapidly moving pyrolytic graphite (PG) crystals with high mosaicity. This leads to a reduction of the energy spread of the incoming neutrons, on the expense of an increase in angular spread (transformation “from white to wide”). The PG crystals, however, cover only half of the circumference of the chopper wheel, the other half being transparent. Thereby, the PST chopper also provides a time-of-flight discrimination against neutrons that are scattered directly from the sample into the detectors without passing through the analyzers.

The speed requirement of 300 m/s for the PG crystals, and the time-of-flight considerations for the entire instrument led to the conception of a PST chopper with a diameter of 1.2 m and a rotation frequency of 4800 rpm. This is a considerable technological challenge. A carbon fiber wheel failed the tests. We had to give up the idea of a magnetic bearing because of unsolved resonance problems. By now, we use an alumold wheel (Fig. 2) with conventional bearings. For a short time, it is pos-

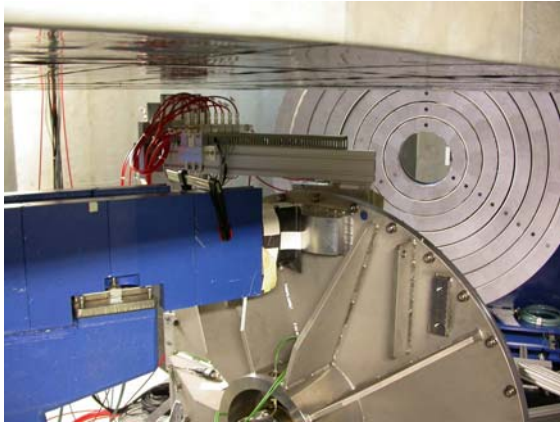


FIG. 3: Inside the instrument housing. On top, cadmium shielding of the ceiling. On the left, in blue: lead shielding of the neutron guide. On the bottom: chopper housing. Above the chopper: a horizontal arm which bears the small-angle detectors. In the rear, ring-shaped: small-angle crystal analyzers.

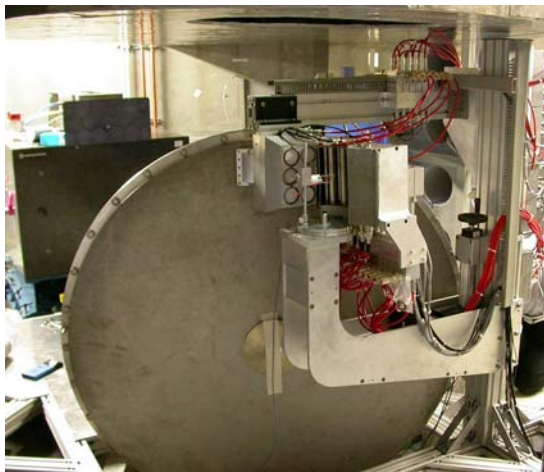


FIG. 4: View from the opposite side. In the middle: sample position, with a laser and a mirror used for optical alignment of monochromator and analyzer crystals. Close to the sample are the detectors. In the rear: the crystal monochromator, mounted on a Doppler drive, on top of a granite block.

sible to operate the wheel at nominal speed. After some hours, however, resonances build up and cause an emergency braking. Therefore, for the time being we operate the PST chopper with one-third of the ideal speed (1600 rpm). This is the only solution that is compatible with the time-of-flight kinematics; it will yield an intensity increase by a factor of two instead of four. In the long term, we will need to replace the chopper wheel by a newly designed one.

Energy scans are performed via Doppler shift in backscattering from moving monochromator crystals.

The Doppler drive has now been successfully tested over

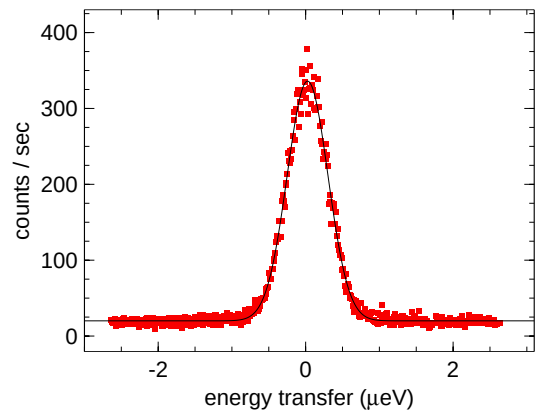


FIG. 5: A resolution scan, measured on a 1.2 mm thick polypropylene sample. Average over all large-angle detectors. Measuring time about 4 minutes. The fitted Gaussian yields a FWHM of $0.65 \mu\text{eV}$.

some 20 days of operation; vibrations were minimal even at the maximum velocity amplitude of 4.7 m/s. All components being installed, the entire spectrometer was optically aligned to about a tenth of a degree with help of a laser beam and mirrors.

Wiring of the instrument and installation of media supply has been partly done and will be completed in 2006, together with the installation of the remaining parts of the safety instrumentation and other components. The detector banks are installed, wired, and connected with the data acquisition electronics. Figures 3 and 4 show main components of the instrument before the flight path between chopper and monochromator was encapsulated with boron rubber shielding.

The kernel of the data acquisition software has been written. During each period of the Doppler drive, detector counts are written into a buffer. After each period, a sine is fitted to the Doppler position log. Then, for each buffered time frame, the Doppler velocity is calculated, taking into account the time lag due to neutron flight paths, and the corresponding energy bins are incremented by the buffered detector counts. Figure 5 shows the best resolution scan measured so far. The full width at half maximum is $0.65 \mu\text{eV}$.

The γ radiation outside the instrument housing is currently of the order of $4\text{--}5 \mu\text{Sv/h}$, with local peaks of about $15 \mu\text{Sv/h}$. To fulfill the FRM-II requirement of less than $3 \mu\text{Sv/h}$ just outside the housing, considerable amounts of lead will have to be assembled around the chopper. Along with improving the γ shielding, we strive for reducing the neutron background in the scattering signal.

Neutron Scattering with Vector Polarisation Analysis on $\text{U}_{14}\text{Au}_{51}$

Werner Schweika,¹ S. Easton,^{1,2} and K.-U. Neumann²

¹*Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich, Germany*

²*Loughborough University, Great Britain*

(Dated: January 19, 2006)

We have developed a new technique of vector polarisation analysis for neutron scattering experiments using an initially precessing neutron polarisation.[1] Different to existing zero-field techniques this method has a much larger potential for applications, since it can be used also on multi-detector and time-of-flight instruments, typical instruments at the new neutron spallation sources. We compare results on the complex magnetic structure of $\text{U}_{14}\text{Au}_{51}$, with previous findings.[2]

In addition to nuclear coherent scattering, one distinguishes two further scattering cross-sections that are related to the spin properties of the neutron probe. First, the scattering amplitude depends on the spins of the nuclei in a sample, which leads to the so-called spin-incoherent scattering and hydrogen serves as a well-known important example. Second, the neutron's magnetic moment is an ideal probe to study magnetic structures and excitations in condensed matter physics.

Using polarised neutrons and polarisation analysis one can separate experimentally all three distinct contributions. The simplest version of polarisation analysis has an important potential for studies of soft matter.[3] The ability to discern spin-flip (sf) scattering from non-spin flip (nsf) scattering, independent of the direction of the polarisation of the incident beam, allows one to separate coherent from incoherent scattering, *i. e.* to separate self- and pair-correlation functions.

The directional dependence of sf and nsf scattering is of interest for studies of magnetic structures and correlations. In general, scattering cross-sections for magnetic scattering depend on the direction of the polarisation of the incident neutron beam with respect to (i) the scattering vector $\mathbf{Q}$ and (ii) the direction of the magnetic moments in the sample. Two simple rules can be established: First, only the component of the magnetic moments which is perpendicular to $\mathbf{Q}$ contributes to scattering of neutrons. Second, the component of the initial neutron polarization, which is perpendicular to the magnetic moments in the sample, changes sign upon scattering. The most common and conventional approach is based on the classical work of Moon, Riste and Koehler[4], where one applies a guide field to turn the polarisation parallel and perpendicular to $\mathbf{Q}$ for the measurements. This will enable to separate and to analyse the magnetic scattering for many cases: in general this applies for paramagnetic samples, and in case of ordered magnetic structures with collinear spins.

There are many interesting materials, for instance multi-ferroics, with complex magnetic structures which cannot be unambiguously examined by such a conventional technique of polarisation analysis. Another topic is in the field of highly correlated electrons with unre-

solved questions concerning possible static and dynamic spin-lattice couplings; these may cause unique non-trivial rotations of the neutron polarisation upon scattering. For solving all these problems it is of high interest to unravel all possible arbitrary rotations of the neutron polarisation.

All previously existing methods for vector polarisation analysis need a zero magnetic field around the sample. The principle to prepare an incident polarisation and measure an arbitrary rotated final polarisation can be realised only for a single specific momentum and energy transfer.

Our method is based on the idea to include and work with precessing neutron polarisation as known from spin-echo techniques.

In the conventional set-up of the DNS instrument at the Jülich research reactor, see Fig. 1, the monochromatic beam will be polarised by the initial polariser, (optionally for inelastic studies the beam will be chopped), then the neutron polarisation may be switched with respect to the guide field by a pi-rotation inside the flipper coil, next the polarisation will enter the field around the sample that can turn the polarisation in x,y,z (or any) direction.

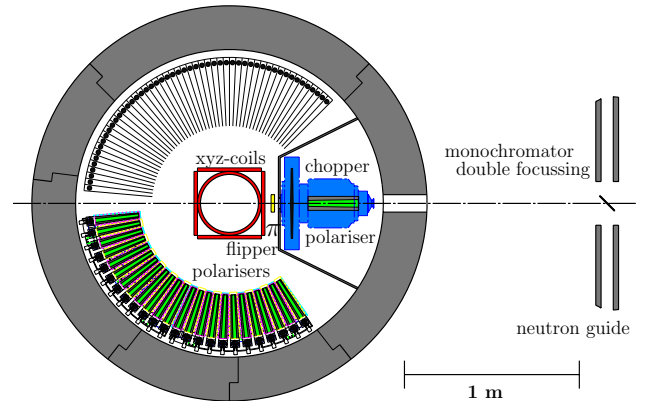


FIG. 1: Scheme of the DNS instrument.

This allows one to measure sf or nsf scattering for all directions, *i. e.* the trace of the polarisation matrix of the initial and final polarisation vector. For polarisation

changes other than 0 or 180 degrees, which contribute to off-diagonal elements of the polarisation matrix, the final polarisation will start to precess in the applied field and appear as a reduced polarisation in the analyser system.

Instead of attempting to realign the precessing scattered neutrons to determine the changes by the sample, thinking of time reversal gives us an elegant key to a simple solution: We may start with an precessing polarisation in the initial path and we may tune the precession angle for a desired polarisation at the sample. Scattering with polarisation changes from a precessing into a non-precessing state will provide us with the off-diagonal elements of the polarisation matrix.

Surprisingly, we do not need any additional sophisticated equipment for full vector polarisation analysis. We only need to induce a $\pi/2$ rotation (instead of 0 or π) by the flipper and to control the precessing phase by a variation of the applied magnetic field.

Previous vector polarisation studies (polarimetry) on $U_{14}Au_{51}$ using the Cryopad device at the ILL revealed a complex chiral magnetic structure, a so-called $q=0$ structure, for which AF-magnetic Bragg peaks coincide with nuclear structural Bragg peaks.[5] As an example a measured polarisation stereogram for the (201) peak is shown.

We repeated the experiment on DNS with the new precession technique for VPA. Part of the results are shown in Fig. 3, for the (201) Bragg peak. The crystal is oriented with its b-axis parallel to the vertical z-axis. The spins are ordered within the a-b plane with a hexagonal star-like structure. The nuclear scattering is confirmed by a measurement above the Neel temperature at 30K and remains independent of the polarisation. At lower temperatures two oscillating curves are measured by turning the flipper in $+\pi/2$ and $-\pi/2$ mode. Maxima are found for a rotation of the polarisation from the z to the y direction. For an initial polarisation along x (which is set parallel to the scattering vector) only spin-flip scattering is observed for the magnetic scattering, excluding a rotation to y or z. For all cases, and taking nuclear scattering into account, an effective depolarisation is observed. These results are in excellent agreement with the pol-figures 6b of Ref.5.

In principle this new precession technique is possible on any neutron scattering instrument which allows for conventional polarisation analysis a la Moon, Riste and Koehler[4]. Different to existing zero-field techniques this method has a unique property which gives a much larger potential for applications, since it can be used also on multi-detector and time-of-flight instruments, typical instruments at the new neutron spallation sources.

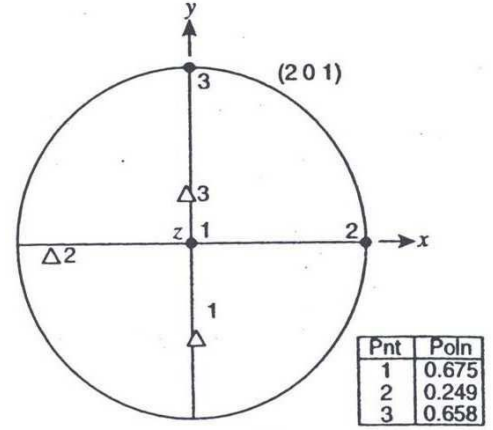


FIG. 2: Stereogram for (201) of $U_{14}Au_{51}$ at 15 K. Full (open) symbols indicate the direction of initial (final) polarisation taken from Brown *et al.*[5]

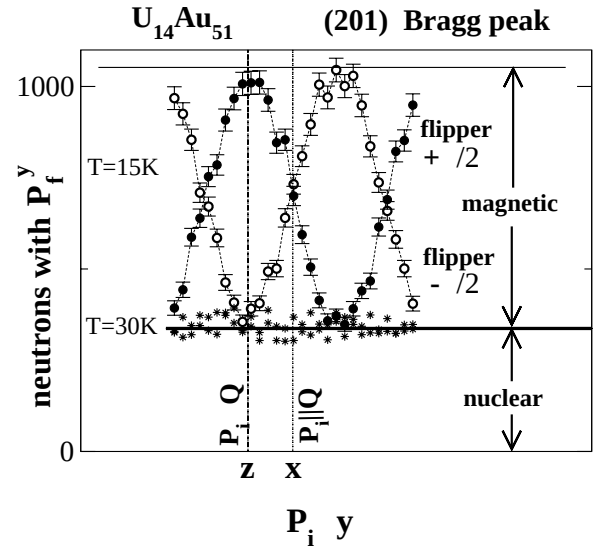


FIG. 3: Vector polarisation analysis on the (201) Bragg peak of $U_{14}Au_{51}$. Initially the polarisation is perpendicular to the applied field in y-direction. At lower temperatures, $T=15K$, there is an additional magnetic contribution for which the neutron polarisation changes from $P_i \parallel z$ to $P_f \parallel y$. At 30K there is only a nuclear Bragg component which continues to precess after the scattering event.

- [1] W. Schweika, Physica B **335** (1-4), pp.157-163 (2003).
- [2] W. Schweika, S. Easton, K.-U. Neumann, Neutron News **16** (2), 14-17 (2005).
- [3] A. Narros, A. Arbe, F. Alvarez, J. Colmenero, R. Zorn, W. Schweika, D. Richter Macromolecules **38**, 9847 (2005).
- [4] R.M. Moon, T. Riste, W.C. Koehler, Phys. Rev. **181**, 920 (1969).
- [5] P. J. Brown *et al.* J. Phys.: Cond. Matter 1997.