

**Dominic Greiffenberg, David Haberthür,
Eberhard H. Lehmann, Jürg Schefer,
Niklaus Schlumpf, Bernd Schmitt
und Marco Stampanoni**

Erweiterung der Sinne

*Messtechnik und Sensorik
am Paul Scherrer Institut*

Nicht im Handel

Beitrag aus:

**Franz Betschon
Stefan Betschon
Willy Schlachter**
Herausgeber

Ingenieure bauen die Schweiz
Technikgeschichte aus erster Hand
Band 2

Zürich, 2014, S. 304–337
Verlag Neue Zürcher Zeitung

Erweiterung der Sinne

9.4

Messtechnik und Sensorik am Paul Scherrer Institut

**Dominic Greiffenberg, David Haberthür, Eberhard H. Lehmann, Jürg Schefer,
Niklaus Schlumpf, Bernd Schmitt und Marco Stampanoni**

Erst das Ergänzen und Erweitern der eigenen Sinne durch den Einsatz technischer Hilfsmittel ermöglicht uns das Erkennen und Erforschen ansonsten unzugänglicher und nicht erfahrbare Wellenfelder und Teilchenstrahlen.

Die Bausteine der Materie auf subatomaren Längenskalen (Protonen, Neutronen, Elektronen usw. und auch die entsprechenden Wechselwirkungsfelder) manifestieren sich je nach Betrachtungsweise entweder als Teilchen oder als Wellen. Dies ist erstaunlich, aber beide modellmässigen Vorstellungen sind aufgrund zahlreicher experimenteller Evidenzen als richtig zu erachten. Es handelt sich um äquivalente physikalische Beschreibungen. Denn diese Bausteine können entweder als Teilchen in einem Detektor einzeln nachgewiesen oder in Form von Wellenmustern, d. h. via Überlagerungs- bzw. Interferenzphänomene, beobachtet werden. Welches dieser «Bilder» dem Verhalten der atomaren Bausteine besser entspricht, hängt wesentlich vom betrachteten Vorgang ab. Für Beschreibungen im Wellenbild kann den Bausteinen mit Ruhemasse zusätzlich eine Wellenlänge zugeordnet werden. Diese Wellenlänge ist durch die Grössen Masse und Geschwindigkeit gegeben, mit denen sich diese Bausteine als Teilchen manifestieren.



Bild 9.4.1 Erweiterung und Ergänzung der eigenen Sinne/Sensoren durch den Einsatz technischer Hilfsmittel. Eine alltägliche Begebenheit zeigt hier auf, welche zentralen Elemente bei einer Beobachtung bzw. bei einem Messprozess mindestens vorkommen. Das Sonnenlicht übernimmt den Part des einfallenden Strahlungsfeldes. Die durch das zu untersuchende Objekt (Sonnenblume) reflektierte Strahlung trägt die gewünschte Information und wird mittels eines optischen Geräts (Vergrösserungsglas) auf die Sensor-Systeme (Augen) der experimentierenden Personen geführt. Diese selbst werten die erhaltenen Bildinformationen aus, sind also für Analyse und Interpretation der Beobachtung zuständig. Neue Erkenntnisse werden möglich durch Vergleiche mit früheren Beobachtungen und Erfahrungen. (www.shutterstock.com, Zugriff 18.10.2014)

Unsere Sinne erlauben uns einen dauernden Informationsaustausch und eine aktive Kommunikation mit der nahen und weiteren unmittelbaren Umgebung durch:

- das Sehen im sichtbaren Wellenlängenbereich der elektromagnetischen Strahlung;
- das Hören von Schallwellen ab einigen 10 Hertz bis etwa 20 Kilohertz und das Aussenden von Schallwellen im gleichen Frequenzbereich;
- das Erkennen chemischer Verbindungen in der Atemluft und bei der Nahrungsaufnahme;
- das Erfühlen von Temperatur und Druck durch eine Vielzahl von Sensoren in unserer Haut;
- die Orientierung im Gravitationsfeld der Erde durch den Gleichgewichtssinn.

Diese technisch gesehen eng begrenzten Kommunikationskanäle lassen sich durch die Entwicklung geeigneter Sensoren und entsprechend angepasster Messtechnik um Größenordnungen erweitern.

Teilchen- und Strahlenquellen

Mit den Augen als Sensoren und mit Experimentatoren als Messsysteme zum Beispiel ist uns nur ein sehr eingeschränkter Bereich der Informationen aus unserer Umgebung und der weiteren Umwelt inklusive dem Weltall zugänglich. Daher ist eine Ergänzung bzw. Erweiterung unserer Sinnesorgane mit technischen Sensoren und der entsprechenden angepassten Messtechnik unumgänglich.

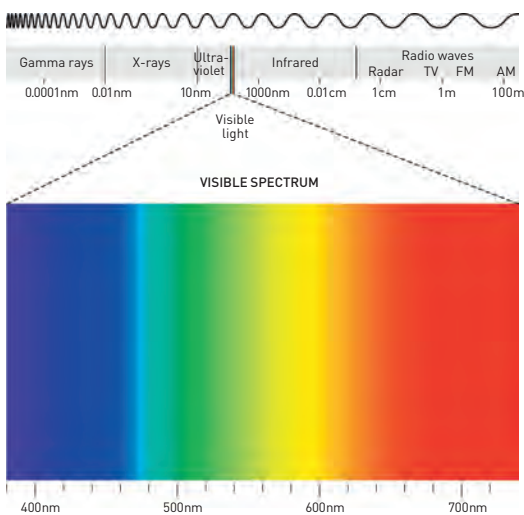


Bild 9.4.2 Elektromagnetisches Spektrum: Die Wellenlänge der Strahlung entspricht in etwa der erreichbaren Ortsauflösung. Als Beispiele seien hier das optische Mikroskop im sichtbaren Bereich und der allgegenwärtige kosmische Mikrowellen-Hintergrund, das «Nachleuchten des Urknalls», erwähnt. (www.shutterstock.com, Zugriff 18.10.2014)

Allgemein ist aufgrund von anstehenden wissenschaftlichen Fragestellungen erst einmal das geeignete optimale Strahlungsfeld zu bestimmen. Die zu erwartenden zusätzlichen Informationen aus einem neuen Experiment, zusammen mit der Art und der Intensität der Wechselwirkungsprozesse zwischen einfallendem Strahlungsfeld und zu untersuchendem Objekt, bestimmen die zu wählende Messanordnung. Für jede einzelne Messaufgabe sind somit die Grundelemente, Art des Strahlungs- bzw. Quellenfelds, zu untersuchendes Objekt und das Sensor- und Messsystem, optimal aufeinander abzustimmen.

Neben den elektromagnetischen Strahlungsfeldern stellt uns die Natur mit Strahlen geladener und ungeladener Teilchen weitere Strahlenarten mit sehr unterschiedlichen Qualitäten zur Verfügung.

Ein einzelnes freies Neutron besitzt im Vergleich zu einem Proton eine leicht höhere Masse und zerfällt mit einer Halbwertszeit von etwa 15 Minuten in ein Proton und in weitere stabile Teilchen. Die Neutronen, die ungeladenen Bestandteile der Atomkerne, stehen im Kernverbund über die sogenannte starke Kernkraft mit den positiv geladenen Protonen in Wechselwirkung und ermöglichen erst dadurch die Existenz stabiler Kerne mit höheren Ordnungszahlen. Infolge gleicher Ladungen stossen sich die Protonen via elektromagnetischer Wechselwirkung gegenseitig ab. Diese Abstossung wird durch die vermittelnde Wirkung der Neutronen in den Kernvolumina (über-)kompensiert. Je höher die Ordnungszahl der Kerne ist, d. h. je mehr Protonen am Aufbau eines einzelnen Kerns beteiligt sind, umso mehr Neutronen sind für den Zusammenhalt dieses Kerns vonnöten. Werden die Kerne zu gross, zum Beispiel Uran mit 92 Protonen, zerfallen diese mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit in einer mittleren charakteristischen Zeitspanne.

Spallations-Neutronenquelle SINQ

Eine mögliche, im Paul Scherrer Institut (PSI) gewählte Methode, um Neutronen aus einem Kernverband herauszulösen, d. h. Strahlen freier Neutronen für Experimente zu erzeugen, ist die sogenannte Spallation. Die Neutronen werden mittels hochenergetischer geladener Teilchen – es handelt sich dabei um Protonen mit 80 Prozent der Lichtgeschwindigkeit – aus Kernen mit hoher Massenzahl befreit. Abhängig von der Grösse des Ausgangskerns und der Protonenenergie beträgt die Anzahl der pro Kern freisetzbaren Neutronen zwischen 10 und 15.

Der Protonenstrahl aus der PSI-Beschleunigeranlage wird nach mehreren Umlenkungen vertikal von unten auf das Spallationstarget der Spallations-Neutro-

nenquelle SINQ geführt. Durch diese Auslegung des Quellenteils in der Anlage verbleibt der gesamte Platz um den Targetblock für Experimentier-Infrastruktursysteme verfügbar. Die bei der SINQ verwendeten Target-Material-Kombinationen sind so zu wählen, dass einerseits die Neutronenausbeute möglichst hoch wird, andererseits jedoch auch die Abführung der anfallenden Wärme ohne Freisetzung von radioaktiven Stoffen, zum Beispiel von Spallationsprodukten, in die Umwelt erfolgen kann. Für den Betrieb der SINQ werden heute mit Zirkonium ummantelte Bleistäbe eingesetzt.



Bild 9.4.3 Schnittbildmodell des SINQ-Target-Blocks mit Einschuss des Protonenstrahls aus der Vertikalen von unten nach der Führung des Protonenstrahls über etwa 200 Meter in Hochvakuumssystemen. Das Spallationstarget befindet sich in der Mitte der Abschirmeinheit. Targetmaterial: Blei in Zirkonhüllen, Kühlmittel: Schwerwasser, Wärmeleistung etwa 1 Megawatt, Kalte Quelle: D_2 bei 25 K (flüssig). (Paul Scherrer Institut)

Bild 9.4.4 Die Spallations-Neutronenquelle SINQ in der Übersicht: in der Mitte der Targetblock mit einer Höhe von rund 15 Metern und einem Durchmesser von rund 12 Metern, umgeben von verschiedenen Experimentieranlagen, die sich hinter entsprechend ausgelegten Abschirmungen befinden. (Paul Scherrer Institut)

Paul Scherrer Institut

Das Paul Scherrer Institut (PSI) ist nach dem bedeutenden Schweizer Physiker Paul Scherrer (1880–1969) benannt. Es entstand 1988 durch Zusammenschluss des 1960 in der Gemeinde Würenlingen östlich der Aare gegründeten Eidgenössischen Instituts für Reaktorforschung (EIR) und des auf der Westseite der Aare in der Gemeinde Villigen gelegenen Schweizerischen Instituts für Nuklearforschung (SIN), das 1968 seine Tätigkeit als Aussenstation der ETH Zürich aufnahm.

Die forschungsmässige Begleitung der schweizerischen Kernkraftwerke sowie die Sicherheit von Nuklearreaktoren allgemein waren wichtige Fragestellungen des EIR und sind es weiterhin im Rahmen des PSI. Das SIN diente als Basis für die Durchführung grösserer Experimente der Kern- und Teilchenphysik.

Das PSI beschäftigt heute über 1900 Personen und ist damit das grösste Schweizerische Forschungszentrum für Natur- und Ingenieurwissenschaften. Jährlich kommen über 2000 Gastwissenschaftler aus der Schweiz und der ganzen Welt ans PSI. Wie die Forscherinnen und Forscher des PSI führen diese an unseren einzigartigen Anlagen Experimente durch, die so woanders nicht möglich sind.

Das PSI ist heute in den Bereichen Materie und Material, Mensch und Gesundheit sowie Energie und Umwelt tätig. Mit Grundlagen- und angewandter Forschung werden nachhaltige Lösungen für zentrale Fragen aus Gesellschaft, Wissenschaft und Wirtschaft bearbeitet: eine gesicherte und klimaneutrale Energieversorgung, eine dauerhafte und bezahlbare Gesundheit der immer älter werdenden Bevölkerung und der Erhalt einer intakten Umwelt. Grundlegende physikalische, materialwissenschaftliche, biologische und strahlenmedizinische Forschungen runden das Spektrum der Tätigkeiten am PSI ab.

Ergänzend zum universitären Bereich liegt ein Schwerpunkt des PSI auf dem Aufbau, dem Betrieb und der Weiterentwicklung von Grossforschungsanlagen, um diese als Nutzerlabor nationalen und internationalen Forschergruppen zur Verfügung zu stellen. Zu diesen Anlagen für Grundlagen-, Material- und Energieforschung sowie für die Bearbeitung von Fragestellungen in Biologie und Chemie gehören neben zahlreichen weiteren Forschungseinrichtungen:

- die SINQ, in Betrieb seit Ende 1996, ist zurzeit die weltweit stärkste und fortschrittlichste Spallations-Neutronenquelle mit kontinuierlichen, nicht gepulsten Neutronenstrahlen;

- die Synchrotron-Lichtquelle Schweiz (SLS), in Betrieb seit 2002. Sie liefert hochintensive Röntgenstrahlung für Forschungszwecke. Die SLS mit ihren mittlerweile 20 Strahllinien erweitert dadurch in hervorragender Weise die Forschungsmöglichkeiten am PSI;
- die neueste Anlage, eine Investition in die Zukunft, der freie Elektronenlaser SwissFEL. Sie ist seit 2013 im Bau und soll 2016/17 ihren Betrieb aufnehmen. Dieser Röntgenlaser wird dann zu einer von weltweit fünf Anlagen dieser Art gehören.

Diese drei Grossanlagen, konzipiert, gebaut und betrieben durch das PSI, sind in ihrer Art einmalig und verfügen über ein weltweit konkurrenzfähiges Angebot an Experimentierstationen. Sie sind im Prinzip hochauflösende Mikroskope und Spektrometer, die der Entwicklung neuer industrieller Verfahren, neuartiger Werkstoffe und neuer Medikamente dienen. Dies stärkt den Forschungsstandort Schweiz langfristig, und gleichzeitig wird ein wesentlicher Beitrag zur künftigen Wettbewerbsfähigkeit der Schweizer Wirtschaft geleistet, einerseits durch die Beteiligung am Bau, andererseits durch die Forschungsmöglichkeiten, die diese technischen Spitzengeräte bieten. Positive Auswirkungen ergeben sich auf die Ausbildung von Studierenden und Doktorierenden sowie von Spezialisten im Bereich der Hochtechnologie in Fachrichtungen wie Leistungselektronik, Computertechnik, Material-, Werkstoff- und Vakuumtechnik, Sensorik oder Bildverarbeitungstechnik.

Von der Konzeption dieser drei Anlagen und von einigen ausgewählten Anwendungen in der Praxis ist in diesem Buch die Rede. Ferner wird im Kapitel 12.7 auf eine weitere Pionierleistung des PSI eingegangen: auf die Protonentherapie zur Krebsbekämpfung. Westlich des heutigen PSI-Geländes in Villigen wird der Innovationspark innovAARE entstehen.



*Paul Scherrer Institut mit der Synchrotronlichtquelle Schweiz (SLS), das torusförmige Gebilde im Vordergrund.
(Paul Scherrer Institut)*

Die bei der Spallation von Kernen entstehenden schnellen Neutronen haben für die vorgesehenen materialwissenschaftlichen Untersuchungen noch nicht die gewünschten Eigenschaften. Die Bewegungsenergien der Neutronen, etwa 1 Mega-elektronenvolt, entsprechen einer Neutronengeschwindigkeit von etwa 14 000 Kilometern pro Sekunde bzw. einer Temperatur von etwa 10 Milliarden Kelvin oder einer Wellenlänge, die grössenordnungsmässig einige zehnmal den linearen Kern-dimensionen entspricht. Zur Untersuchung von Materialien mit inneren Struktur-dimensionen im Ångströmbereich ($1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ Nanometer}$) müssen die Neutronen ebenfalls Wellenlängen in dieser Grössenordnung erreichen, d. h. auf ausreichend tiefe Energien bzw. Temperaturen «gekühlt» werden. Dies geschieht durch Stossvorgänge in geeigneten Moderatormaterialien analog dem Abbrems-mechanismus der Kugeln im Billardspiel. Moderatormaterialien sind Schwerwas-ser (D_2O) oder flüssiger schwerer Wasserstoff (D_2). Damit erhält man Neutronen im Bereich sogenannter thermischer Energien mit 25 Millielektronenvolt, 20 Grad Celsius, einer Wellenlänge von $1,8 \text{ \AA}$ und kalter Energien mit 2 Millielektronenvolt, $-250 \text{ Grad Celsius}$ und einer Wellenlänge von 4 \AA .

Da Neutronen von aussen betrachtet keine elektrische Ladung aufweisen, ist es nicht möglich, ihre Bewegungsrichtung mit elektromagnetischen Feldern zu be-influssen. Vielmehr hat die Extraktion geeigneter Neutronenstrahlen durch ent-sprechende Öffnungen in der Aussenwand der Quellenanlage zu erfolgen. Aus Gründen der Strahlensicherheit weist der SINQ-Target- und Moderatorblock recht grosse Abmessungen auf. Jede der aufgebauten Strahllinien ist daher ein komple-xes Gebilde aus einem Strahlkanal, der etwa 6 Meter lang ist, einem Strahlver-schluss, Kollimatoren und der eigentlichen Probenumgebung mit einem Neutro-nen-Messsystem für den Nachweis der Neutronenverteilungen nach den Streu-prozessen.

Insgesamt verfügt die SINQ über mehrere Strahlöffnungen für thermische und kalte Neutronen. Eine der kalten Strahlöffnungen ist mit mehreren Neutronen-leitern bestückt. Diese versorgen die Experimentieranlagen einer ganzen Halle mit kalten Neutronen. Kalte Neutronen können durch Totalreflexion verlustfrei über weite Strecken – 100 Meter und mehr – über sogenannte Neutronenleiter transpor-tiert werden. Die inneren Oberflächen der Neutronenleiter sind mit speziellen neutronenreflektierenden Materialien beschichtet.

Die Mehrzahl der Experimentiereinrichtungen an der SINQ steht für Neutro-nen-Diffraktions-Experimente zur Verfügung. Diese Strahllinien erlauben, Infor-mationen mit atomarer Auflösung über Strukturen von Festkörpern und deren

Verhalten bei unterschiedlichen äusseren Randbedingungen, zum Beispiel hohen und tiefen Temperaturen, Druckänderungen über einen weiten Bereich, intensiven Magnetfeldern usw. zu erhalten. Ein breites Spektrum unterschiedlicher moderner Experimentiereinrichtungen ist dafür an der SINQ installiert. Neben den Diffraktions-Strahlröhren verfügt die SINQ über weitere zwei Anlagen für direkt abbildende Experimente mit Neutronen und zwei Anlagen für Materialbestrahlungen bzw. -aktivierungen.

Das PSI betreibt seit den 1970er-Jahren mit grossem Erfolg einen ringförmigen Protonen-Beschleuniger, der dank innovativer Weiterentwicklungen über viele Jahre den Leistungsweltrekord für einen kontinuierlichen Protonenstrahl bei einer Protonenenergie von 590 Megaelektronenvolt und einem Protonenstrahlstrom von 2,4 Milliampère hält. Die Konzeption und der Bau dieser Beschleunigeranlage erforderten die Lösung anspruchsvollster natur- und ingenieurwissenschaftlicher Problemstellungen. Dieser Protonenstrahl wird heute unter anderem zum Betrieb der SINQ eingesetzt. Für allgemein verständliche weitere Informationen siehe bei Hennemann, L. (2014) und Piwnicki, P. (2014).

Entstehung der Synchrotronstrahlung

Einsteins Relativitätstheorie ist immer noch eines der allgemein bekanntesten und experimentell hervorragend bestätigten wissenschaftlichen Gedankengebäude. Mit bahnbrechenden Konzepten Raum und Zeit betreffend fasziniert diese Theorie Tausende von Menschen seit über hundert Jahren. Die experimentelle Grundlage der Relativitätstheorie basiert auf einem erstaunlichen Phänomen: Die Lichtgeschwindigkeit c ist eine sogenannte Naturkonstante und somit unabhängig von dem Bezugssystem, in dem diese gemessen wird. Dies ist auch in dem Falle gültig, wenn sich eines von zwei Messsystemen mit einer Geschwindigkeit u gegenüber dem anderen bewegt. Diese Tatsache ist überraschend, weil für langsame Objekte wie Autos oder Züge die Geschwindigkeit erfahrungsgemäss vom Bezugssystem abhängig ist. Bei einer Synchrotronstrahlungsquelle geht es in diesem Zusammenhang darum zu verstehen, was genau passiert, wenn ein winziges Objekt, zum Beispiel ein Elektron, mit einer sehr hohen Geschwindigkeit u unterwegs ist und beinahe die Lichtgeschwindigkeit c erreicht. Bewegt sich dieses Elektron zudem noch in einem Magnetfeld, wird das Ganze hochinteressant. Aus der klassischen elektromagnetischen Theorie ist bekannt, dass sogenannte Dipolstrahlung ausgesandt wird, wenn ein geladenes Teilchen beschleunigt wird.

Aus der klassischen Mechanik weiss man ebenfalls, dass das Wirken einer Kraft benötigt wird, um eine Masse zu beschleunigen. Solch eine Kraft wirkt, wenn sich ein geladenes Teilchen in einem Magnetfeld bewegt. Damit wird es möglich, die ursprüngliche Bewegungsrichtung des Teilchens zu ändern. Gleichzeitig bringt man das Teilchen dazu, Dipolstrahlung auszusenden. Aufgrund der Invarianz der Lichtgeschwindigkeit in verschiedenen Bezugssystemen kann man nun zeigen, dass die dabei entstehende Dipolstrahlung für einen Beobachter in seinem «Ruhesystem» unter einem sehr kleinen Winkel ausgestrahlt wird – und dass die entsprechende Wellenlänge bei geeigneter Wahl der Magnetstrukturen im Röntgenbereich liegen muss.



Bild 9.4.5 Blick in den Tunnel der Synchrotron-Lichtquelle Schweiz (SLS): 600 Magnete sind im Einsatz. Die einen halten die Elektronen auf ihrer Kreisbahn, weitere zwingen sie zusätzlich auf sehr enge Slalombahnen. Dadurch senden diese Elektronen Synchrotron-Strahlung entlang ihrer Bewegungsrichtung aus. (Paul Scherrer Institut)

Bei einer Synchrotron-Lichtquelle werden verschiedene Ablenkmagnete entlang einer Kreisbahn, dem sogenannten Speicherring, positioniert. Damit werden Elektronen mit relativistischen Geschwindigkeiten ($u \approx 0,999 c$) in einem evakuierten Rohr auf dieser Kreisbahn gehalten. Bei jedem Ablenkmagneten reagieren die Elektronen auf die resultierende Kraft, werden somit entsprechend beschleunigt und ändern ihren Kurs. Sie bleiben dadurch selbst auf einer kreisförmigen Umlaufbahn und strahlen elektromagnetische, stark in Bewegungsrichtung gebündelte Strahlung ab, die sogenannte Synchrotronstrahlung. Dieser Mechanismus zur Erzeugung elektromagnetischer Strahlung ist ebenfalls als eine der grossartigen experimentellen Evidenzen anzusehen, die bestätigen, dass die Relativitätstheorie Einsteins gegenüber den klassischen Theorien Newtons und Maxwells einen wesentlich umfassenderen Gültigkeitsbereich in der Naturbeschreibung zeigt.

Eigenschaften der Synchrotronstrahlung

Bei Synchrotronquellen der dritten Generation, wie zum Beispiel bei der Synchrotron-Lichtquelle Schweiz (SLS) am PSI, ist der Durchmesser des Elektronenstrahls sehr klein. Er misst in etwa 0,01 Millimeter im Vergleich zum Durchmesser seiner Umlaufbahn, die gegen 100 Meter beträgt. Ein ausgeklügeltes Rückkopplungssystem mit vielen Magneten sorgt dafür, dass die Elektronen präzise auf ihrer Kreisbahn gehalten werden können. Weicht der Elektronenstrahl im Tunnel etwas von der Ideallinie ab, so lassen sich die entsprechenden Ablenkmagnete einzeln ansteuern, um den Strahl wieder in seine Standardumlaufbahn zurückzudrängen. Auf diese Weise kann der Strahl örtlich sehr stabil gehalten werden. Diese und viele weitere technische Feinheiten haben dazu geführt, dass der Elektronenstrahl der SLS zu den stabilsten der Welt gehört. Diese Eigenschaften des Elektronenstrahls führen zu einer geometrisch sehr präzise lokalisierten und stabilen Quelle für die Synchrotronstrahlung selbst. Trotz der kleinen Dimensionen des Elektronenstrahls ist das Licht einer Synchrotronquelle über zehn Grössenordnungen intensiver als jenes einer konventionellen Röntgenröhre.

Experimentiereinrichtungen, welche die Synchrotronstrahlung nutzen, liegen üblicherweise sehr weit vom Quellpunkt der Strahlung entfernt. Bei einer solch einzigartigen Kombination von geometrischen und quantitativen Faktoren spricht man von einer brillanten Quelle. Die Grösse Brillanz beschreibt gleichzeitig sowohl die Intensität als auch die Bündelung des Synchrotron-Strahls. Eine Kerze besitzt zum Beispiel eine sehr geringe Brillanz, da sich das Licht in alle Richtungen gleichmässig ausbreitet. Eine Taschenlampe schneidet in diesem Vergleich bereits

besser ab, da ihr Lichtstrahl mittels geeigneten optischen Elementen gebündelt wird. Steht eine hochbrillante Quelle zur Verfügung, ergeben sich daraus Messresultate mit wesentlich verbesserter Auflösung in den räumlichen und zeitlichen Dimensionen. Dazu kommt ausserdem, dass brillante Quellen intrinsisch bis zu einem gewissen Grad kohärent sind. Dies ermöglicht, dass Interferenzphänomene genutzt werden können, um aus den Messungen zusätzliche Informationen über die untersuchten Objekte zu erhalten.

Das Synchrotron-Licht kann mithilfe von speziellen Spiegeln, Kristallen oder komplexen optischen Komponenten wie Fresnellinsen oder Beugungsgittern sehr genau in Energie, Geometrie und Intensität verändert werden. Damit schaffen es die Forscher, ideale Strahleigenschaften auch für sehr spezielle Untersuchungen einzustellen.

Höchstleistungen der Ingenieurskunst

Der im Aufbau befindliche freie Elektronenlaser SwissFEL für den Nanometer-Wellenlängenbereich, d. h. für Röntgenstrahlung im Wellenlängenbereich von Millionstelmillimetern, wird der Spitzenforschung neue Möglichkeiten eröffnen. Die Baukosten werden rund 275 Millionen Franken betragen.

Die erarbeiteten Kompetenzen aus dem SLS-Projekt haben die Fachleute des PSI genutzt, um mit dem SwissFEL erneut eine technologisch einzigartige Anlage zu entwickeln, die wie die SLS international Massstäbe setzen wird. So wurden neuartige Ideen entwickelt, um den SwissFEL kompakter und preiswerter zu bauen, als die anderen sich im Betrieb oder Aufbau befindlichen Röntgenlaser in Deutschland, den USA, in Japan und Südkorea. Neue Massstäbe setzt der SwissFEL auch mit seinem Energiekonzept. Er wird der weltweit erste energieoptimierte freie Elektronen-Röntgenlaser sein. Der Stromverbrauch wird im Vergleich zu anderen Anlagen drastisch reduziert sein. Zudem verfügt der SwissFEL als einziger Röntgenlaser über eine Wärmerückgewinnungsanlage. Die Abwärme des SwissFEL wird in das Wärmenetz des PSI eingespeist werden.

Der SwissFEL wird für wissenschaftliche Untersuchungen extrem intensive und extrem kurze Blitze von Röntgenlicht erzeugen. Dieses wird von den sehr schnellen Elektronen abgestrahlt, die von starken Magneten auf eine enge, schlangenförmige Bahn gezwungen werden. Wie bei der SLS gilt auch hier: Elektronen, die ihre Geschwindigkeit bzw. ihre Richtung ändern müssen, senden elektromagnetische Strahlung aus. Je nach Art und Grösse der erzwungenen Elektronenbewegung können das Radiowellen, sichtbares Licht oder eben Röntgenlicht sein.

Die SwissFEL-Anlage erstreckt sich über eine Länge von knapp 740 Metern. Sie besteht aus vier Teilen: einem Injektor, einem Linearbeschleuniger, einer Anordnung von Undulatoren und den Experimentiereinrichtungen. Die Erzeugung des Röntgenlichts beginnt im Injektor. Mit einem Lichtblitz werden Elektronen aus einem speziell geformten Metallstück herausgeschlagen und durch ein elektrisches Feld vorbeschleunigt. Von dort werden sie im Ultrahochvakuum zum Linearbeschleuniger geführt, der sie mithilfe starker Mikrowellenfelder auf nahezu Lichtgeschwindigkeit bringt.

Damit sind die Elektronen schnell genug, um in Undulatoren – so nennen die Fachleute die verwendete Magnetanordnung – auf eine schlangenförmige Bahn geschickt zu werden. Dabei erzeugen die Elektronen die Röntgenstrahlung, die sich lawinenartig zu dem einzigartig intensiven Röntgenlicht des SwissFEL verstärkt. Am SwissFEL werden dazu auf einer Länge von 60 Metern zwölf Undulatoren mit je 1060 Magneten hintereinander angeordnet sein. Die notwendige hohe mechanische Präzision, die beim Aufbau dieser Undulatoren zu erreichen ist, gilt als Höchstleistung der Ingenieurskunst.

Die Endenergie der Elektronen beträgt 6 Milliarden Elektronvolt. Die Wiederholrate 100 Pulse pro Sekunde mit je zwei Elektronenpaketen à 1 250 000 000 Elektronen und einer Dauer von 1 bis 60 Femtosekunden. Die Brillanz ist 10 Milliarden mal höher als bei herkömmlichen modernen Synchrotron-Strahlen.

Nachdem die Elektronen das Röntgenlicht abgestrahlt haben, werden diese nicht mehr benötigt, abgelenkt und in einer Auffangvorrichtung eingefangen. Die Röntgenlaserpulse hingegen werden zu den Experimentierplätzen geleitet und hier den Forschenden für ihre Experimente zur Verfügung stehen.

Wie schnell ist ultraschnell?

Chemische Reaktionen, d. h. Umgruppierungen und Reaktionen von Atomen, Atomgruppen und Molekülen zu neuen Molekülen mit geänderten physikalischen und chemischen Eigenschaften, vollziehen sich typischerweise in ultrakurzen Zeitspannen der Grössenordnung Femtosekunden. Mithilfe der SwissFEL-Röntgenpulse wird es möglich sein, solch kurzzeitige Veränderungen atomarer und molekularer Strukturen zu vermessen. Damit werden die Voraussetzungen zu einem wesentlich besseren Verständnis der «Arbeitsweise» von Atomen und Molekülen geschaffen.

Solche Röntgenblitze dauern etwa 10 Femtosekunden. Wie kann man sich eine so kurze Zeitspanne vorstellen? Erinnern wir uns an den Comic-Helden Lucky



Bild 9.4.6 Injektor-Testanlage SwissFEL. (Paul Scherrer Institut)

Luke, an den Mann, der schneller zieht als sein Schatten. Aber wie schnell muss Lucky Luke denn seinen Revolver ziehen, um schneller als sein Schatten zu sein? Licht benötigt etwa 10 Nanosekunden, um eine Entfernung von 3 Metern zu durchlaufen. So viel Zeit hätte also auch Lucky Luke, um die Waffe schneller zu ziehen, als sich sein Schattenbild auf einer Wand in dieser Distanz verändern kann. Das ist etwa 1 Million mal schneller als die Belichtungszeit – etwa 10 Millisekunden – eines normalen Fotoapparats. Die Aufnahmen, die man mit dem SwissFEL von Atomen und Molekülen machen wird, werden jedoch nochmals 1 Million mal schneller geschossen, als Lucky Luke schießen müsste. Oder anders formuliert: Der SwissFEL wird mit Belichtungszeiten von 10 Femtosekunden arbeiten – und dies ist eine 1 Billion mal kürzere Belichtungszeit als diejenige einer normalen optischen Kamera.

Bildgebende Messmethoden

Nur wenige Materialien in unserer Umwelt sind für sichtbares Licht transparent, etwa Glas, Wasser und einige Kunststoffe. Das sichtbare Licht wird in der Regel von Oberflächen entweder reflektiert oder nur teilweise absorbiert, und somit werden diese Objekte sichtbar. Innere Eigenschaften der Gegenstände bleiben dabei meist verborgen.

Mit der Entdeckung Wilhelm Conrad Röntgens ermöglichte die nach ihm benannte Strahlung erstmals, nach Durchdringung des menschlichen Körpers Knochen und Gewebe auf den Röntgenfilmen unterschiedlich abzubilden. Eine solche Darstellung wird dadurch möglich, da verschiedene Materialien ungleiche Anteile der Strahlung streuen und somit die auf dem Film auftreffenden unterschiedlichen Intensitäten als Bild festgehalten werden können.

Bis heute steht die Röntgentechnik für die medizinische Diagnose und Therapie im Einsatz, und ein Ende der Weiterentwicklung ist nicht absehbar. Im Bereich der technischen Diagnostik hat sich das «Röntgen» ebenfalls etabliert und ist als Verfahren zur zerstörungsfreien Materialprüfung eine zertifizierte Methode.

Thermische und kalte Neutronen besitzen wie Röntgenstrahlen die Eigenschaft, dickere Materialschichten zu durchdringen. Sie können dadurch Informationen aus dem Inneren der Untersuchungsgegenstände erschliessen.

Sowohl das «Röntgen» wie auch die Neutronenradiografie arbeiten nach einem einfachen Schema. Der einfallende Strahl wird durch die Probe mehr oder weniger abgeschwächt, und der Reststrahl wird mittels eines Flächendetektors in der Art eines Schattenbilds aufgezeichnet. Eine einfache Ausführung von Flächendetektoren ist seit Beginn der Röntgenfilm, dessen Schwärzung in etwa ein Mass für die Intensität der transmittierten Strahlung ist. In den helleren und dunkleren Bereichen dieser Bilddaten können dann die mehr oder weniger dichten Materialstrukturen durch geeignete Bildanalysemethoden erkennbar gemacht und quantifiziert werden.

In der Zwischenzeit, typisch in den 1990er-Jahren, wurden neue Detektorsysteme entwickelt, die mehr und mehr in der Lage sind, den Film zu ersetzen. Im Bereich der medizinischen Anwendungen war die treibende Kraft die Reduktion der Strahlendosen für die Patienten. Im wissenschaftlichen Bereich liefern heute digitale Detektorsysteme die Möglichkeit, moderne Methoden der Bildverarbeitung zu implementieren. Diese gestatten es, wesentlich mehr und detailliertere Information über die Untersuchungsobjekte zu erfassen.

Ein sehr wichtiger Aspekt bei der Methode der Bildgebung mittels transmittierter Strahlen ist die Aufbereitung des Ausgangsstrahls selbst. Hier sind das zu wählende Energieband, die räumliche Begrenzung der Strahlgeometrie, die sogenannte Kollimation, und die Strahlintensität bedeutende Parameter. Die Energie der Strahlung bestimmt sowohl die mögliche Dicke der zu durchstrahlenden Materialien als auch den möglichen Kontrast, den eine dünne Probenschicht noch liefern kann. Die Strahlgeometrie ist entscheidend, wie gut die Bildschärfe bzw. die erreichbare Ortsauflösung wird.

Bildgebung mittels Neutronendurchstrahlung (Neutron-Imaging)

Was unterscheidet die Neutronenstrahlung von der Röntgenstrahlung? In einer ersten Annäherung kann man sagen, dass ähnliche bzw. sich ergänzende Bilddaten generiert werden können. Während Metallteile von Neutronen nahezu ungehindert durchdrungen werden, ist der erreichbare Kontrast im Falle wasserstoffhaltiger Komponenten (Plastikteile) wesentlich grösser als beim Röntgen.

Die physikalischen Ursachen für den spezifischen Unterschied in den Bilddaten liegen in der Art der Wechselwirkung der Neutronen bzw. der Röntgenstrahlung mit den untersuchten Materialien begründet. Neutronen wechselwirken nur mit Atomkernen. Diese Wechselwirkung ist gar isotopenspezifisch. Die Röntgenstrahlung hingegen « sieht » ausschliesslich die Elektronenhüllen der Atome. Je mehr Elektronen sich in den Atomhüllen befinden, d. h. je schwerer das Material ist, desto mehr Röntgenstrahlen werden gestreut bzw. absorbiert.

In Datenbanken mit den entsprechenden Stärken der Wechselwirkungen sind alle relevanten Informationen erfasst und abrufbar. Beide Durchstrahlungsmethoden

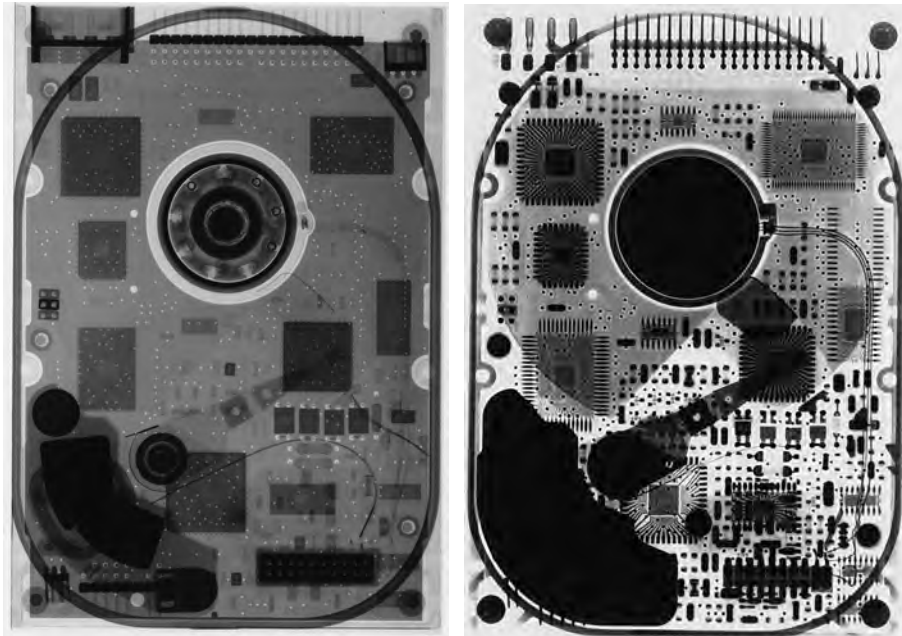


Bild 9.4.7 Vergleich von Neutronenradiografie- und Röntgenaufnahme am Beispiel der Festplatte eines PC (links: Neutronenbild, rechts: Röntgenbild).
(Paul Scherrer Institut)

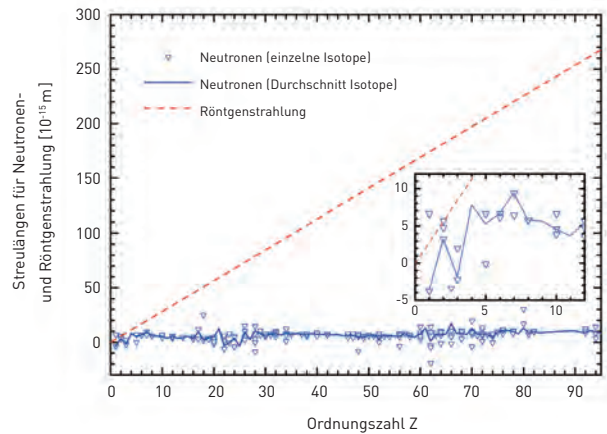


Bild 9.4.8 Streuvermögen für Röntgen- (rote Linie) respektive Neutronenstrahlung (blaue Linie) als Funktion der Elementordnungszahl Z . Röntgenstrahlung (gestrichelte rote Linie) wird an den Elektronenhüllen der Atome gestreut, Neutronen (selber Kernbestandteile) jedoch an den viel kleineren Atomkernen. Die Isotopenabhängigkeit im Fall der Neutronen zeigen die blauen Dreiecksymbole. Die blaue Linie folgt dem Mittelwert der natürlich vorkommenden Isotope. (Paul Scherrer Institut mit Neutronendaten aus Sears, 1992)

thoden haben sich in den letzten Jahren rasant weiterentwickelt. Neben den Fortschritten auf dem Gebiet der Detektoren, die es erlauben, viel empfindlicher, schneller und kontrastreicher abzubilden, sind vor allem neue Methoden entwickelt worden, die auf der Verarbeitung digitalisierter Bildinformationen basieren. Hier steht an erster Stelle die Tomografie, die immenses Potenzial für praktische Anwendungen hat.

Bildgebung mittels Röntgendurchstrahlung (Röntgen-Imaging)

Die einzigartigen Eigenschaften der Synchrotronstrahlung ermöglichen es, zerstörungsfrei dreidimensionale Bilder aus dem Inneren verschiedenartigster Proben zu gewinnen. Durch die Bildgebung mit Synchrotronstrahlung können Auflösungen ab dem Bereich einiger Nanometer bis zu einigen Mikrometern erreicht werden. Indem verschiedene Kontrastmechanismen – angepasst an die jeweiligen wissenschaftlichen Fragestellungen – eingesetzt werden, erschliesst die auf Synchrotronstrahlung basierte Röntgenbildgebung wissenschaftlich wertvolle Informationen in den verschiedensten Forschungsdisziplinen.

Durch die extrem hohe Intensität und exzellente Qualität der Synchrotronstrahlung in Kombination mit angepassten Detektionssystemen und höchsten Bildaufnahmeleistungen ist es möglich, dynamische Prozesse im Bereich von Nanosekunden an aufwärts abzubilden. Da die Energie der Röntgenstrahlen hoch genug ist, um eine Vielzahl von Materialien zu durchdringen, können auch Experimente durchgeführt werden, bei denen Abläufe *in situ* zu untersuchen sind: so beispielsweise das Verhalten von Materialien bei spezifischen Temperaturen, Umgebungsdrücken oder chemischen Umgebungen.

Röntgenmikroskopie und Tomografie

Die tomografische Röntgenmikroskopie ermöglicht es, aus dem Inneren von Proben Informationen in drei Dimensionen zerstörungsfrei zu erhalten, selbst dann, wenn diese Proben für sichtbares Licht undurchlässig sind. Diese Art der Bildgebung, eingeführt 1973, war anfangs vor allem in der medizinischen Bildgebung verbreitet und wird heute in vielen wissenschaftlichen Disziplinen angewandt: in den Materialwissenschaften, den Umwelt- und Erdwissenschaften, in der biomedizinischen und pharmazeutischen Forschung sowie bei den Untersuchungen von Lebensmitteln, von Kunstgegenständen und von paläontologischen Proben, um nur die weitestverbreiteten Anwendungsbereiche zu nennen.

Üblicherweise werden während der Rotation einer Probe um 180 Grad im Röntgenstrahl etwa 1500 einzelne Radiografiebilder aufgenommen. Diese Bilder entstehen nach Durchdringung der Probe und nach Aufzeichnung der verbliebenen Röntgenstrahlen wie bei konventionellen Röntgenbildern. Die Röntgenstrahlen, die das Probenmaterial durchdringen, werden entsprechend der Zusammensetzung der Proben abgeschwächt, sodass das Signal nach dem Austritt aus der Probe die integrale Information über die Abschwächungen entlang des Strahlenwegs trägt. Die Röntgenstrahlen werden nach dem Durchdringen der Probe in sogenannten Szintillatormaterialien in sichtbares Licht gewandelt, durch eine herkömmliche Mikroskopoptik vergrößert und anschliessend mithilfe einer CMOS-Kamera digitalisiert. Verschiedene optische Objektive ermöglichen auf einfache Art 10- bis 20-fache Vergrößerungen, sodass die einzelnen Pixel in den entstehenden digitalisierten Bildern Abständen von bis zu 0,3 Mikrometern innerhalb der Probe entsprechen.

Der interne Aufbau der Probe kann anhand von Tausenden einzelner Radiografien anschliessend im Computer rekonstruiert werden. Ein in dieser Art rekonstruierter digitaler Datensatz entspricht einem dreidimensionalen Bild aus dem Inneren der Probe. D.h. dass in der anschliessenden Auswertung die Probe am Rechner virtuell aufgeschnitten werden kann, um so zerstörungsfrei quantitative und qualitative Informationen in hoher Auflösung aus dem Inneren praktisch eines jeden Materials zu gewinnen. Beispielsweise erlaubt die röntgentomografische Mikroskopie mit Synchrotronstrahlen Einblicke in die Lungenentwicklung von Säugetieren, wenn zu verschiedenen Zeitpunkten dreidimensionale Aufnahmen der beschriebenen Art gemacht werden. Die hohe Auflösung der röntgentomografischen Mikroskopie macht es möglich, die kleinsten inneren Strukturen der Lungen, die Lungenbläschen, einzeln abzubilden, ohne die Probe selbst zu zerstören.

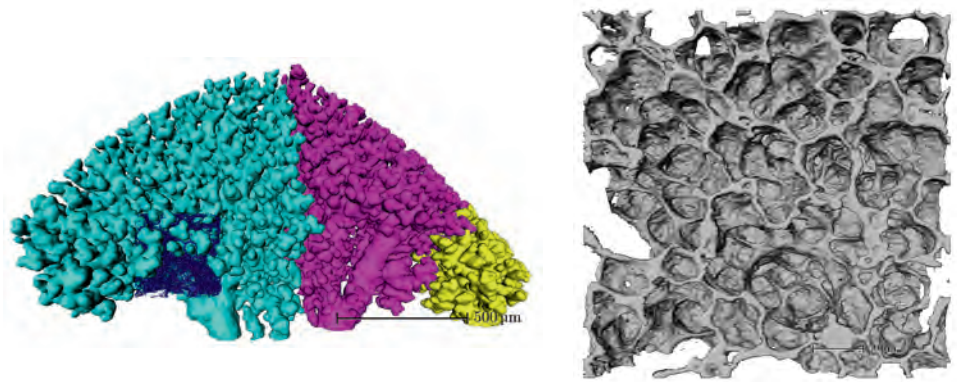


Bild 9.4.9 Links: Dreidimensionale Visualisierung der Spitze einer Rattenlunge. Unabhängige Luftwegsegmente sind in unterschiedlichen Farben gekennzeichnet. Der blaue Würfel hat eine Kantenlänge von 256 Pixeln mit einer Pixelgrösse von 1,4 Mikrometern. Rechts: Ausschnittsvergrößerung des blauen Würfels, einzelne Lungenbläschen werden sichtbar. (Modifiziert aus Haberthür et al., 2010)

Mit speziell ausgerüsteten Kameras ist es heute möglich, tomografische Untersuchungen mit einer Auflösung im Submikrometerbereich in weniger als einer Sekunde durchzuführen. Dies ermöglicht die Erforschung von sich verändernden Systemen, gewährt Einblick in die Dynamik dieser Systeme und markiert einen wichtigen Schritt von der statischen tomografischen Bildgebung hin zu tomografischen Filmen.

Phasenkontrast-Tomografie und Ptychografie

Besonders bei biomedizinischen Fragestellungen ist es sehr wichtig, die Dosisbelastung der Probe zu minimieren. Das gelingt durch die Auswertung der Phaseninformation der aus der Probe austretenden Strahlenfelder. Damit erhält man einen besseren Kontrast als mit der Absorptions-Kontrast-Methode.

Die erreichbare Auflösung mit den beiden erwähnten Methoden ist durch die physikalische Pixelgröße des eingesetzten Detektors und durch die Eigenschaften der verwendeten Röntgenquelle limitiert. Durch die direkte Analyse des an der Probe gestreuten Lichts und durch die Optimierung der Eigenschaften des einfallenden Röntgenlichts können noch höhere Auflösungen erreicht werden. Diese sind nur noch durch die Strahlungstoleranz der zu untersuchenden Proben limitiert. Streusignale werden gewonnen, indem die Probe durch eine ebene Welle ausgeleuchtet wird. Durch eine mathematische Analyse der gemessenen Streusignale können Informationen über die Zusammensetzung der Probe gewonnen werden.

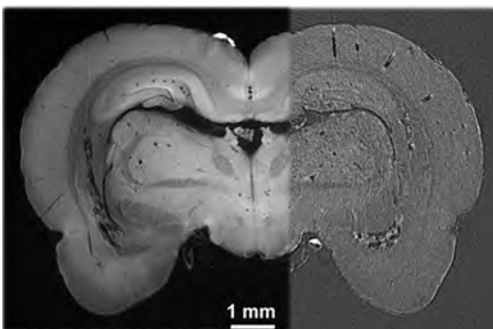


Bild 9.4.10 Schnitt durch ein Maushirn. Links mittels Phasenkontrast-Tomografie (Pixeldimension: 15 Mikrometer), rechts mittels Absorptions-Kontrast-Methode. (Aus Stampanoni et al., 2014; adaptiert aus McDonald et al., 2009)

Die Ptychografie nutzt eine sogenannte strukturierte Beleuchtung der Probe. Der einfallende Röntgenstrahl wird zur Erhöhung der Kohärenz durch Blenden begrenzt. Mit dem resultierenden, sehr dünnen Strahl wird dann rasterförmig das gesamte Probenvolumen abgetastet. Mit iterativen Analysealgorithmen können Informationen mit extrem hoher Auflösung über das Innere der Probe gewonnen werden. Die Ptychografie liefert von Natur aus quantitative Informationen über die Elektronendichte innerhalb der Probe. Diese Werte können dann direkt über die chemische Zusammensetzung in Massendichten umgerechnet werden. Da gleichzeitig Röntgenabsorption und Phaseninformationen aufgenommen werden, ist es mit der Ptychografiemethode häufig möglich, direkt Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung der Probe zu gewinnen, und zwar mit höchster Auflösung – bis in den Bereich von einigen Nanometern.

Diffractionsmethoden

Ein Forscherteam, bestehend aus Friedrich, Knipping und von Laue, konnte erstmals mit der 1895 entdeckten Röntgenstrahlung Abbilder eines Kristalls erzeugen. Dem späteren Nobelpreisträger William L. Bragg gelang es 1913, die Positionen der Atome bzw. Ionen in einem Kochsalzkristall zu bestimmen. Die Substanz, die wir als kubische Salzkristalle kennen, besteht aus winzigsten Würfelchen, bei denen die Ionen Natrium und Chlorid auf den Ecken und in der Mitte der Flächen dieser Würfelchen sitzen. Moderne Varianten dieser Apparaturen – die Diffraktometer – gehören deshalb heute zur Standardinstrumentierung in Materialforschungslabors. Grossanlagen wie Synchrotrons und freie Elektronenlaser erweitern die Genauigkeit und die zeitliche Auflösung der Diffraktionsmethode um mehrere Grössenordnungen.

Um die Atomanordnungen exakt bestimmen zu können – beispielsweise in neuen Materialien für elektronische Komponenten und für Energiespeicher, in neuen, leichteren Werkstoffen oder in Proteinen und Medikamenten – sind Präzisionsinstrumente erforderlich. Das sind typische Einsatzgebiete der sogenannten Diffraktometer, speziell konzipierte Mikroskope, die es erlauben, Atompositionen mit Genauigkeiten von unter 0,1 Nanometer (= 1 Ångström) zu beobachten. Bereits winzigen Kristallen mit Längendimensionen im Bereich von Mikrometern können mit diesen Geräten Informationen über die inneren Strukturen entlockt werden, z.B. von Proteinen.

Proteine bilden die Grundbausteine lebender Organismen und sind an allen lebenswichtigen Vorgängen beteiligt. Viele Proteine üben auch katalytische Funk-

tionen bei chemischen Reaktionen aus. Andere binden Hormone und Signalmoleküle, die damit das Verhalten von Zellen und von ganzen Organen steuern. Ein kompliziert aufgebautes Proteinmolekül besteht aus Tausenden einzelner Atome, die auf einzigartige Weise angeordnet sein müssen, damit das Molekül seine Aufgabe erfüllen kann. Handelt es sich um kristallisierbare Proteine, so können die Positionen der Bausteine/Atome in drei Dimensionen mittels Diffraktion erschlossen werden.

Auf welchen physikalischen Gesetzmässigkeiten basiert die Diffraktionsmethode? Der Streumechanismus sowohl von Röntgen- als auch von Neutronenstrahlen kann im Wellenbild als Überlagerungseffekt, als Interferenz gestreuter ebener Wellen beschrieben werden, d. h. dass sich die an den einzelnen Atomen einer Probe gestreuten Wellen gegenseitig überlagern. Dabei ergeben sich auslöschende und sich verstärkende Interferenzbereiche für die auslaufenden Kugelwellen. Unter diskreten Winkeln kann in der Folge ein Beugungsmuster beobachtet werden.

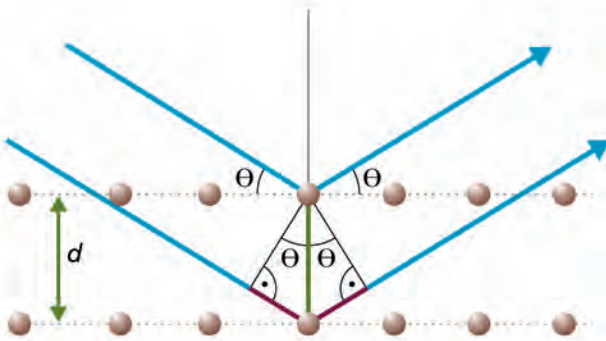


Bild 9.4.11 Die gestreuten Wellen addieren sich (konstruktive Interferenz) bei Kristallproben (dreidimensionales Punktgitter), wenn die Weglängenunterschiede der von verschiedenen Kristallebenen gestreuten Wellenfelder einem Mehrfachen der Wellenlänge λ entsprechen (Bragg'sche Bedingung, $\sin\theta = \frac{\text{Mehrfaches von } \lambda}{2d}$). (Paul Scherrer Institut)

Der Interferenzmechanismus lässt sich sehr einfach durch die Streuung eines Laserstrahls, wie ihn beispielsweise ein Zeigelaser liefert, an einem eindimensionalen, regelmässigen Objekt, einem Gitter, experimentell veranschaulichen. In einer angemessenen Distanz, wesentlich grösser als die Wellenlänge der Strahlung selbst, beobachtet man wiederum ein regelmässiges Muster. Die Ablenkwinkel für dieses Muster sind dabei vom Abstand der Linien des verwendeten Gitters und der Wellenlänge des Lichts abhängig. Zwischen dem Gitterabstand, der Wellenlänge der einfallenden Strahlung und den Winkeln, unter denen die Interferenzstreifen erscheinen, ergibt sich eine einfache Gesetzmässigkeit, in der Physik als Bragg'sches Gesetz bekannt. Damit ein konstruktives und beobachtbares Interferenzmuster entsteht, muss die Bragg'sche Bedingung erfüllt sein. Auch Wellenmuster auf einem See oder Schallwellen folgen diesem Gesetz.

Viele Materialien können in kristalliner Form als Pulver oder als Einkristalle hergestellt werden und besitzen somit dreidimensional periodische innere Strukturen. Analog zur Lichtstreuung an einem Gitter entstehen bei der Bestrahlung kristalliner Materialien mit Röntgenlicht oder mit Neutronen charakteristische, exakte Interferenzmuster. Damit sind die Distanzen zwischen den verschiedenen Gitterebenen innerhalb von Kristallen einer präzisen Messung zugänglich.

Beobachten lassen sich diese Interferenzen mit für die entsprechende Strahlung geeigneten Detektorsystemen. Zur exakten Bestimmung von Strukturen müssen die Wellenlänge der verwendeten Strahlung und die inneren Dimensionen der zu untersuchenden Objekte in etwa übereinstimmen. D.h. auch, dass mit Licht wesentlich feinere Details aufgelöst werden können als zum Beispiel mit Schallwellen. Interatomare Abstände in Festkörpern und Flüssigkeiten liegen im Ångströmbereich. Der Abstand der Wasserstoff- und Sauerstoffatome in einem Wassermolekül ist beispielsweise 0,9 Ångström. Derjenige der Natrium- und Chloratome in einem Kochsalzkristall liegt bei 1,4 Ångström. Sowohl die Wellenlängen typischer Röntgenstrahlung an SLS-Strahllinien als auch die Wellenlängen thermischer Neutronen aus der SINQ liegen in diesem Bereich. Ultraviolettes Licht und weiche Röntgenstrahlung an der SLS und thermische und kalte Neutronen an der SINQ werden unter anderem zur Untersuchung von magnetischen Materialien und von Supraleitern verwendet. Harte Röntgenstrahlung wird zur Entschlüsselung von Proteinstrukturen in der Proteinkristallografie und für tomografische Aufnahmen eingesetzt.

Wo setzt man Diffraktometer ein? Eine wichtige Gruppe neuer Materialien beispielsweise hat multiferroische Eigenschaften. D.h. Magnetismus, elektrische Eigenschaften und innere Struktur stehen hier in engem Zusammenhang. Ein solcher Stoff, zum Beispiel Terbium Mangan Oxid (TbMnO_3), zeigt bei tiefen Temperaturen gleichzeitig ferromagnetisches und ferroelektrisches Verhalten. In einem Magnetfeld wird er ferromagnetisch magnetisiert und in einem elektrischen Feld ändert er ferroelektrisch seine innere Polarisation. Bei einem solchen Material ändern sich die magnetische Struktur und die Positionen der Bausteine der Kristalle gleichzeitig. Mechanismen dieser Art könnten in künftigen Elektronikbauteilen für die Datenspeicherung eine Rolle spielen, sofern es gelingt, die physikalischen Zusammenhänge im Detail zu verstehen und aufgrund dieser Erkenntnisse gezielt neue Substanzen zu entwickeln.

Symmetrien und Kristallografie

Viele Festkörper weisen in ihrer inneren Struktur Symmetrien wie Spiegelebenen, Drehachsen oder Inversionszentren auf. Diese vereinfachen die Strukturbeschreibung wesentlich, da die gesamte Information bereits in einer verkleinerten Zelle enthalten ist. Die Kristallografie spielt in den Naturwissenschaften eine zentrale Rolle, und zwar mit Anwendungen, die von der Materialforschung bis hin zur Medizin reichen. Annähernd 30 Nobelpreise in Physik, Chemie und Medizin basieren auf ihren Anwendungen, und die Vereinten Nationen würdigten dies 2014 mit der Ausrufung des Jahres der Kristallografie.

Überraschend war 1981 die Entdeckung von fünfzähligen «Drehachsen» in der Natur. Sie besagt, dass nach einer Rotation im Raum um $360^\circ/5$ das Objekt wieder identisch zur Ausgangsposition erscheint. Kristalle dieser Art widersprachen den bisherigen Theorien, die nur zwei-, drei-, vier- und sechszählige Achsen zuließen. In islamischen Ornamenten haben fünf- und zehnzählige Drehachsen jedoch bereits Jahrhunderte zuvor Eingang gefunden, in der Natur war so etwas aber nicht beobachtet worden. Quasikristalle – wie Wissenschaftler diese neuartigen Kristallformen bezeichnen – besitzen keine kleinsten Baueinheiten, die sich regelmässig und flächendeckend im Raum wiederholen. Als Beispiel aus der Natur sei die Struktur einer schnell abgekühlten Aluminium-Mangan-Legierung genannt, die sich nur beschreiben lässt, wenn man neben den drei Dimensionen des Raums eine weitere Dimension einführt. Für die Entdeckung und Auflösung dieses angeblichen Widerspruchs zu den bisherigen Annahmen im Jahre 1981 wurde Dan Shechtman 2011 der Nobelpreis für Chemie verliehen.

Diffractionsexperimente mit Neutronen und Röntgenlicht

Neutronen- und Röntgen-Diffraktions-Experimente erlauben uns, Strukturen bis in den Bereich von Bruchteilen von Ångström zu vermessen, da die Wellenlängen dieser Strahlungsarten gut im Bereich der zu untersuchenden Bindungslängen in den Materialproben liegen. Symmetrien im inneren Aufbau dieser Materialien erlauben eine wesentliche Vereinfachung der Auswertung, und die Kristallografie stellt uns die entsprechenden mathematischen Werkzeuge zur Verfügung. Neuere und stärkere Quellen werden es in Zukunft ermöglichen, immer kleinere Probenmengen zu analysieren und die Messzeiten zu verkürzen. Damit wird es ebenfalls möglich werden, zum Beispiel strukturelevante Information von Zwischenprodukten während des Ablaufs chemischer Prozesse selbst zu erhalten. Eine solche neue Röntgenquelle ist der freie Elektronenlaser SwissFEL bzw. die Europäische Spallationsneutronenquelle ESS in Lund, Schweden.

Welche Strahlungsquelle eingesetzt wird – entweder Röntgenlicht aus einem Laborgerät, der SLS oder Neutronenstrahlen aus der SINQ –, hängt von verschiedenen Faktoren ab. Dies sind Probengrösse, Materialeigenschaften und die aus dem Experiment benötigte Information. Generell sind Synchrotronquellen um mindestens fünf Grössenordnungen intensiver als Neutronenquellen. Neutronen aber zeigen im Falle leichter Elemente oder magnetischer Strukturen ein besseres Streuverhalten. Änderungen der interatomaren Abstände in Hochtemperatur-Supraleitern konnten deshalb zuerst mittels Neutronendiffraktion experimentell nachgewiesen werden, da die Positionen der Sauerstoffatome ausschlaggebend sind.

Wir stellen als Beispiel ein Diffraktometer zur Untersuchung von Pulverproben vor. Eine Pulverprobe enthält Kristallite des zu untersuchenden Materials in allen räumlichen Orientierungen. Dies hat zur Folge, dass aus den punktförmigen Intensitätsmaxima der Streubilder der vielen Einzelkristalle durch die räumliche Mittelung die sogenannten Debye-Scherrer-Ringe als 1D-Diffraktogramme entstehen. Diese Messmethode wurde 1915 von Peter Debye und Paul Scherrer entwickelt. Die aus der Quelle extrahierten Neutronen werden vorerst unter Zuhilfenahme der Braggstreuung z.B. an einem Germaniumeinkristall monochromatisiert, d.h. nur Neutronen in einem sehr engen Wellenlängenbereich werden auf die Probe geleitet. Die durch die Pulverprobe gestreuten Neutronen werden in einem mit Gas (^3He , BF_3) gefüllten Detektor via Kernreaktion und Ionisation nachgewiesen. Mithilfe des gemessenen Diagramms kann der Experimentator die innere Struktur des Probenmaterials erschliessen.

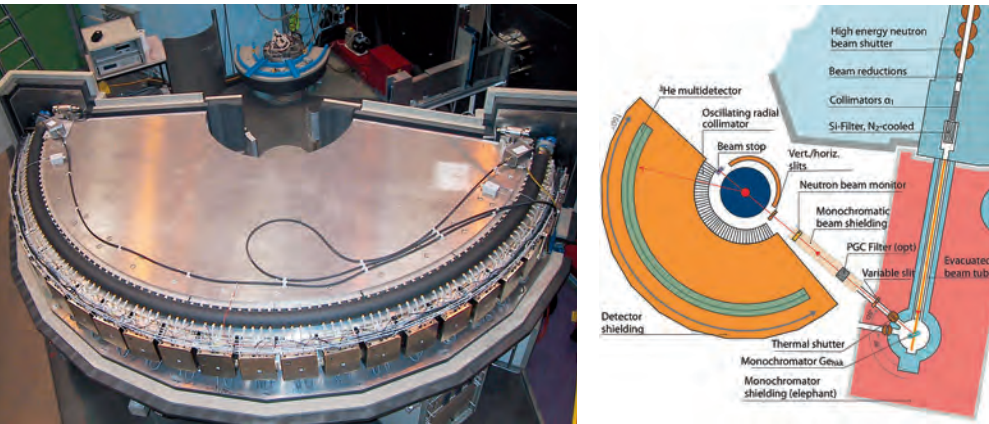


Bild 9.4.12 Hochauflösendes Pulverdiffraktometer HRPT an der Spallations-Neutronenquelle SINQ. Links der positionsempfindliche Detektor, rechts eine schematische Übersicht des ganzen Diffraktometers. Durch Streuung an einem Germanium-Einkristall werden monoenergetische Neutronen auf die Pulverprobe (rot) gestreut. Der Neutronendetektor (im linken Bild ohne Abschirmung) registriert die an der Pulverprobe gestreuten Neutronen simultan in einen Bereich von 160 Grad und liefert ein sogenanntes Diffraktogramm, das mit den berechneten Werten aus dem vorgeschlagenen Modell verglichen wird. (Paul Scherrer Institut)

Oft sind die verfügbaren Probenmengen neuer Substanzen extrem klein, zum Beispiel bei Proteinen. Hier können uns die sehr intensiven Röntgenstrahlen der Synchrotronquellen die gewünschten Informationen liefern. Die Kenntnis über die detaillierte Struktur der Proteine ist entscheidend, um deren biologische Funktion zu verstehen. Ausgehend von der dreidimensionalen Struktur biologisch aktiver Moleküle und dem Wissen um ihre Funktionsweise in einem Organismus ermöglicht die Proteinkristallografie als Werkzeug in der Hand der Pharmakologen die Entwicklung neuer Medikamente und die Optimierung der Wirkungsweise. Selbst wenn Proteine kristallisiert werden können, erreichen sie aber, beispielsweise im Falle von Membranproteinen, selten Längendimensionen von über 10 Mikrometern. Bei makromolekularen «biologischen Maschinen» mit hohen Molekulargewichten ist selbst bei relativ grossen Kristallen die Anzahl der Moleküle im Kristallgitter klein – und somit die Diffraktion sehr schwach. Die Synchrotronstrahlung erlaubt durch ihre hohe Intensität und ihre extreme Brillanz erstmals Diffraktionsexperimente an solch kleinen und schwach streuenden Proben.

Mit Neutronen können ebenfalls magnetische Strukturen erforscht werden, da das Neutron selbst ein eigenes magnetisches Moment besitzt. Im ferrromagnetischen Material TbMnO_3 konnte in einem Diffraktionsexperiment auf dem Einkristalldif-

fraktometer TriCS nachgewiesen werden, dass beim Phasenübergang bei Temperaturen zwischen 35 Kelvin (= -238 Grad Celsius) und 15 Kelvin (= -258 Grad Celsius) ein Inversionszentrum in der magnetischen Struktur verloren geht. Ein solcher Verlust ist die Voraussetzung, dass sich im Inneren eines Materials ein elektrisches Feld aufbauen kann. Für Anwendungen ist dieser Mechanismus deshalb interessant, da durch ein elektrisches Feld – somit durch einen leicht änderbaren äusseren Parameter – die magnetischen Eigenschaften beeinflusst werden können.

Zur Untersuchung von mechanischen Spannungen innerhalb verschiedener technischer Materialien und Werkstoffe wird ebenfalls die Diffraktionsmethode eingesetzt, da sich, zusammen mit der Bragg'schen Beziehung, die Gitterabstände sehr genau bestimmen lassen. So sind damit Rückschlüsse über Zusammenhänge zwischen Spannungen und Strukturänderungen möglich. Neutronen werden hier oft bevorzugt, da sie nur wenig absorbiert werden und auch grössere Werkstücke problemlos durchdringen können.

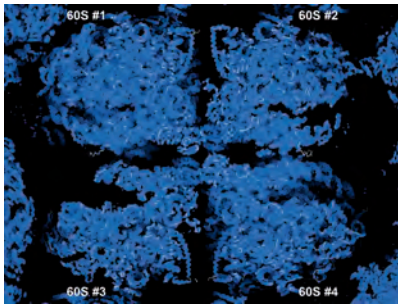


Bild 9.4.13 Elektronendichteverteilung der ribosomalen Untereinheit 60S. Die kristalline Struktur ist monoklin mit Gitterkonstanten von $32,0 \times 38,9 \times 53,5$ Nanometer³. Grundlage dieser Strukturanalyse sind 2650 einzelne Diffraktionsbilder mit je 0,08 Sekunden Messzeit. Detektor: DECTRIS Ltd./Baden. (Klinge, S. et al., 2011)

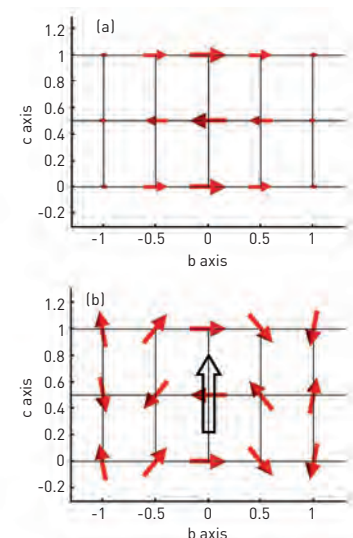


Bild 9.4.14 Schematische Anordnung der magnetischen Momente der Manganatome (Mn) in $TbMnO_3$ bei (a) $T=35$ K und (b) $T=15$ K. Das Material verliert bei tiefer Temperatur die Zentrosymmetrie, da sich die magnetischen Momente der Manganatome verkippen, nachgewiesen durch Neutronen-Einkristalldiffraktionsexperimente. (Kenzelmann et al., 2005)

Atome und Moleküle bei der Arbeit beobachten

Mit den Messsystemen an der SwissFEL-Anlage wird man kurzzeitige Veränderungen von atomaren und molekularen Strukturen erfassen können. Ob es dabei um die Abgasreinigung oder die Herstellung von Grundstoffen für die chemische Industrie geht: Bei zahllosen technischen Vorgängen werden Stoffe in chemischen Reaktionen ineinander umgewandelt. Besondere Substanzen – von Chemikern als Katalysatoren bezeichnet – sorgen dafür, dass solche Reaktionen möglichst effizient ablaufen können. Diese beteiligen sich zwar an den Reaktionen, werden dabei aber nicht verbraucht. Obwohl Reaktionen mit Katalysatoren seit vielen Jahrzehnten in unzähligen Anwendungen genutzt werden, wird ihre Funktionsweise oft noch nicht umfassend verstanden. Ein solches Verständnis könnte aber zum Beispiel helfen, Katalysatoren zu entwickeln, um Stoffe umweltfreundlicher und energiesparender ineinander umzuwandeln. Dass bis heute solche Vorgänge nicht im Detail verstanden sind, liegt unter anderem daran, dass chemische Reaktionen extrem schnell ablaufen.

Die Zeit, die vergeht, wenn sich Bindungen in einem einzelnen Molekül lösen und sich Bindungen zu einem neuen Molekül bilden, dauert oft gerade mal 0,1 Billionstelsekunden (Billionstel = Millionstel eines Millionstels).

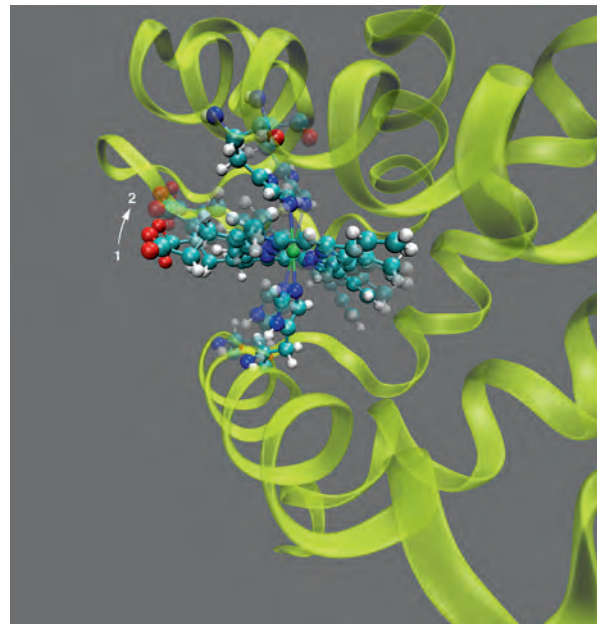
Um Reaktionsabläufe genauer zu verstehen, möchten Wissenschaftler die vorbereitenden Schritte einer chemischen Reaktion beobachten, also gewissermaßen einen Film mit extrem kurzen Belichtungszeiten für die einzelnen Bilder einer Sequenz aufnehmen. Der SwissFEL wird genau dies ermöglichen, indem intensive Röntgenlichtblitze mit einer sehr präzisen Zeitstruktur erzeugt werden, um so einzelne Schritte der Reaktion «ablichten» zu können. Im vorliegenden Fall ist die Blitzdauer rund 10 Femtosekunden. 1 Femtosekunde = 0,001 Billionstelsekunden.

Das oben beschriebene Beispiel der Proteine wird hier wieder aufgenommen. Proteine innerhalb einer lebenden Zelle sind keine starren Körper, sondern führen funktionsspezifische Bewegungen aus, deren Dauer zwischen Femtosekunden und einigen Sekunden liegen können. Mit ultrakurzen Röntgenblitzen, wie sie am SwissFEL erzeugt werden, lassen sich die Bewegungen von Molekülen zeitlich verfolgen und so die Prozesse im Detail beobachten, an denen diese Moleküle beteiligt sind. Künftige Experimente sollen beispielsweise dazu beitragen, die molekularen Prozesse zu verstehen, die bei Infektionskrankheiten, funktionseinschränkenden Erkrankungen der Zellen in Organen, beispielsweise des Nervensystems, der Gelenke, der Organe des Verdauungstrakts oder bei Tumorerkrankungen, eine Rolle spielen. Diese Erkenntnisse werden in Zukunft die Entwicklung von massgeschneiderten Medikamenten ermöglichen.

Der räumliche Aufbau von Proteinen kann, wie oben beschrieben, schon heute sehr erfolgreich mit dem Verfahren der Proteinkristallografie an der SLS untersucht werden. Solche Messungen ergeben aber nur ein statisches Bild dieser komplexen biologischen Maschinen. Gleichzeitig gibt es eine grosse Zahl wichtiger Proteine, die sich mit diesem Verfahren, wenn überhaupt, nur mit grossen Schwierigkeiten untersuchen lassen. Es handelt sich dabei um die sogenannten Membranproteine, die in der Aussenhaut der Zellen eingebettet sind.

Deshalb kennen wir die Struktur vieler Membranproteine noch nicht. Neben Membranproteinen können am SwissFEL auch die Strukturen ganzer Proteinkomplexe, die in vielen Varianten in Zellen und Organen auftreten, effizient untersucht werden. Dies ist mit konventioneller Proteinkristallografie nicht möglich. Die SwissFEL-Anlage wird uns ausserdem ermöglichen, katalytisch wirksame Proteine, sogenannte Enzyme, direkt bei der Arbeit zu beobachten. Diese Enzyme beeinflussen wichtige chemische Umwandlungen und erleichtern den Ablauf chemischer Reaktionen sowie die gezielte Herstellung chemischer oder biologischer Moleküle. Dank der hohen Präzision in der Zeitstruktur der Röntgenpulse an der SwissFEL-Anlage wird es möglich sein, einzelne Reaktionsschritte wie das Aufbrechen und Neubilden chemischer Bindungen direkt zu beobachten.

Bild 9.4.15 Die Bewegung des Myoglobinmoleküls (von Position 1 nach Position 2), das für lebenswichtige Vorgänge beim Atmen verantwortlich ist, kann per Computer mit geeigneten Berechnungsmethoden vorausgesagt werden. Eine experimentelle Überprüfung solcher theoretischer Modelle wird erst mit der neuen SwissFEL-Anlage möglich sein. (Universität Basel)



Entwicklung geeigneter Sensoren und Erweiterung der Messtechnik

Neue Konzepte und Entwicklungen, um gestreute Teilchen nachweisen und vermessen zu können, wurden bereits in den 1990er-Jahren angedacht und in Angriff genommen, um die extremen Anforderungen an die Experimentierstationen am Large Hadron Collider (LHC) des CERN erfüllen zu können. Das PSI war an der Entwicklung und ist auch an der Weiterentwicklung der sogenannten Pixeldetektoren für die Experimentierstation Compact Muon Solenoid (CMS) federführend beteiligt (Piwnicki, P., 2013). Aus diesem Engagement hat sich als PSI-interner Spin-off die Entwicklung von Pixeldetektoren für die Röntgenanlagen der SLS und der SwissFEL ergeben. Der Erfolg dieser ersten Entwicklungen führte 2006 zur Gründung eines Spin-offs: Dectris Ltd. Die Firma mit Sitz in Baden ist mittlerweile international sehr erfolgreich am Markt und beschäftigt bereits über 60 Mitarbeitende.

Im Falle der Röntgenstrahlung handelt es sich, wie beim sichtbaren Licht im Wellenbild beschrieben, um elektromagnetische Strahlung. Sie manifestiert sich im Teilchenbild als aus einzelnen Energieportionen aufgebaut, den sogenannten Photonen. Das sind die Quanten des elektromagnetischen Felds. Der Energieinhalt eines einzelnen Röntgenquants ist bis über 1000-fach höher als derjenige eines optischen Lichtquants, was unter anderem auch die Fähigkeit der Röntgenstrahlung, optisch dichte Materie zu durchdringen, erklären kann.

Um Röntgenquanten oder geladene Teilchen detektieren zu können, müssen diese Quanten mittels geeigneter Wechselwirkungen mit Materie nachweisbar gemacht werden. Dies geschieht mithilfe aktiver Medien, den Sensoren, in denen die Energien der Quanten aufgenommen und in eine messbare Form überführt werden können. Damit geeignete Sensormaterialien für einen weiten Anwendungsbereich ausgewählt werden können, müssen erst die Wechselwirkungen der unterschiedlichen Teilchenstrahlen mit Materie bekannt sein. Im Falle des bei den bildgebenden Verfahren beschriebenen Röntgenfilms geschieht dies durch die chemische Zerlegung der Bestandteile einer photosensitiven Schicht. Dies führt nach der Entwicklung in einem chemischen Prozess zu einer dauerhaften Schwärzung des Films. Die messbare Größe wird somit als Kontrast zwischen den belichteten, d. h. den geschwärzten, und den unbelichteten, d. h. den hellen Stellen auf dem Film festgehalten. Um eine ausreichende Schwärzung zu erhalten, bedarf es einer hohen Anzahl an Röntgenquanten, sodass mit solchen Messanordnungen keine Aussagen über einzelne Quanten gemacht werden können.

Um Einzelphotonen-Sensitivität zu erreichen, muss die Wechselwirkung eines jeden einzelnen Photons mit dem Sensormaterial ein für eine Registrierung aus-

reichendes Messsignal liefern, so wie dies beispielsweise bei einem Geiger-Müller-Zählrohr der Fall ist. Hier ist das aktive Medium ein geeignetes Gas, das durch die Wechselwirkung mit einem Röntgenquant ionisiert wird und in einem hohen elektrischen Feld über Stossionisation im Gasvolumen selbst mittels «Ladungsmultiplikation» zu einem ausreichenden elektrischen Signal führt. Dies kann zum Beispiel durch einen charakteristischen Knackton in einem angeschlossenen Verstärker mit Lautsprecher hörbar gemacht werden. Während aus der Belichtung eines Röntgenfilms lediglich Ortsinformationen gewonnen werden können, ist ein Informationsgewinn mittels Geiger-Müller-Zählrohr gegeben – betreffend der Anzahl, der zeitlichen Verteilung und in beschränkter Masse auch betreffend der Energie einzelner Röntgenquanten. Mit Festkörpersensoren, sogenannten Szintillatoren, oder mit Halbleitern ist es möglich, bestehende Nachweisgrenzen in den älteren Detektionsprozessen zu überwinden. Eine Voraussetzung hierfür ist, dass die messbare Grösse im Sensor ein zur Energie des Quants proportionales Signal liefern kann. In einem Szintillator beispielsweise ist diese messbare Grösse sichtbares Licht einer charakteristischen Farbe und einer Intensität, die direkt proportional zur Energie des absorbierten Quants ist. Bei einem Halbleitersensor werden, ebenfalls proportional zur Energie des Quants, freie Ladungsträger gebildet, die mithilfe eines elektrischen Felds gesammelt und einem Verstärker zugeführt werden können.

Für Röntgendetektoren häufig verwendete Halbleiter-Sensor-Materialien sind Silizium (Si), Germanium (Ge), Cadmium(zink)tellurid (CdZnTe) oder Galliumarsenid (GaAs). Diese Materialien unterscheiden sich hauptsächlich durch ihre Eigenschaft, Röntgenquanten unterschiedlicher Energie verschieden effizient zu absorbieren. Aufgrund der guten Verfügbarkeit und der hohen Qualität hat sich Silizium als Sensormaterial für die Detektion von Röntgenstrahlung im Energiebereich bis 20 Kiloelektronenvolt/0,062 Nanometer etabliert. Die Absorptionseffizienz für Röntgenquanten hängt massgeblich von der Kernladungszahl des Sensormaterials ab.

Die Erzeugung eines elektrischen Felds im Inneren eines Halbleitersensors geschieht im einfachsten Fall, modellmässig analog zu einem Plattenkondensator mit Dielektrikum, durch zwei plan-parallele Kontaktflächen auf den Vorder- und Rückseiten des Sensors. Die Feldlinien im Sensor verlaufen dann senkrecht zu den Sensoroberflächen. Mithilfe moderner Prozesstechnologien ist es möglich, die eine Seite des Sensors anstelle einer durchgehenden Flächenkontaktierung mit vielen kleinen Teilflächen zu versehen. Eine einzelne dieser Teilflächen wird dann

als Streifen bei eindimensionalen oder als Pixel bei zweidimensionalen Detektorsystemen bezeichnet. Das elektrische Feld für die Sammlung der freien Ladungsträger innerhalb des Sensors wird dadurch lediglich in der Nähe der strukturierten Seite verändert. Ansonsten bleibt der Feldverlauf ähnlich dem Fall mit durchgehenden Kontaktflächen. Da aufgrund des Feldlinienverlaufs im Sensor die Ladungen immer senkrecht zu den Kontaktflächen gesammelt werden, erhält man durch die Strukturierung eine bessere Information über den Interaktionspunkt des detektierten Quants innerhalb des Sensors und somit eine genauere Ortsinformation.

Der Nachweis eines Quants erfolgt in einem zweistufigen Prozess. Der erste Prozessschritt dient dazu, die absorbierte Energie in eine messbare Grösse zu überführen. Im zweiten Prozessschritt werden die messbaren Signale in eine für den Anwender verständliche Form gewandelt. Der erste Schritt wird mithilfe einer speziellen Ausleseelektronik realisiert. Aus den vorliegenden elektrischen Signalen werden verschiedene Informationen wie Position, Zeitpunkt bzw. Energie des Ereignisses extrahiert. Es gibt unterschiedliche Ansätze, um die Informationen eines Sensors in der nachfolgenden Ausleseelektronik weiterzuverarbeiten.

Eine gängige Methode, kompakte Sensorsysteme zu bauen, besteht darin, die Ausleseelektronik auf einer zweiten Siliziumscheibe auf die Grösse eines Sensorpixels zu begrenzen und dann zu vervielfachen, damit jeder Sensorpixel über seine eigene Ausleseelektronik verfügt. Daraus ergibt sich die Herausforderung, die gesamte gewünschte Funktionalität eines Auslesekanals auf einer eng begrenzten Fläche unterzubringen. Für die Detektorentwicklungen am PSI bedeutet dies konkret, dass für Pixelgrössen zwischen 25 Mikrometer mal 25 Mikrometer und 200 Mikrometer mal 200 Mikrometer jeweils die gleiche Pixelfläche für die Pixelelektronik zur Verfügung steht. Zum Vergleich: Der Durchmesser eines menschlichen Kopfhaares beträgt ungefähr 60 bis 80 Mikrometer. Um eine solche Kompaktheit zu erreichen, werden die Ausleseelektroniken nebeneinander auf einem Chip placiert. Dazu wird auf Prozesstechnologien, d.h. auf standardisierte integrierte Schaltungstechnologien bekannter Chiphersteller zurückgegriffen. Der Entwurf und die Entwicklung der Ausleseelektronik finden am PSI statt. Lediglich die Produktion der Chips übernehmen jeweils die entsprechenden Hersteller.

Im Vergleich zu den modernsten Produktionsprozessen, bei denen aktuell Strukturgrössen auf den Chips von bis zu 22 Nanometern verwendet werden können, werden die PSI-Auslese-Chips mit Strukturgrössen von 110 bis 250 Nanometern entwickelt, da für diese älteren Prozesse die Herstellungskosten deutlich

geringer sind. Eine wesentliche praktische Herausforderung liegt in der Herstellung zuverlässiger Verbindungen zwischen den Sensoreinheiten und der Ausleseelektronik. Dazu werden kleine Kugeln eines Lots auf die segmentierten Kontakte der Sensoreinheiten aufgebracht. Diese Kugeln haben typischerweise, jeweils abhängig von der Pixelgröße, einen Durchmesser von 13 bis 25 Mikrometern und werden auf die Kontaktflächen des Auslesechips gepresst. Somit erhält man eine Detektionseinheit, bestehend aus einem segmentierten Sensor und einem ebenso segmentierten Auslesechip. Jeder Sensorpixel in einer solchen Detektionseinheit verfügt somit über seine eigene Ausleseelektronik.

Nach der Sammlung der Ladungsträger in den Sensorpixeln erfolgt die weitere Signalaufbereitung in der Ausleseelektronik. Für viele Anwendungen, zum Beispiel bei bildgebenden Verfahren, ist es ausreichend, die Anzahl der Photonen zu kennen, die während der Belichtungszeit registriert werden konnten. Daher sind lediglich die einzeln eintreffenden Photonen zu zählen. Dies erklärt somit auch den englischen Namen «single photon counting» für diesen Analyseprozess. Ein Photon wird im Sensorpixel absorbiert, und es wird eine entsprechende Anzahl freier Ladungsträger erzeugt. Durch das angelegte elektrische Feld im Sensorpixel werden diese Ladungsträger zur Ausleseelektronik transportiert. Die pro Ereignis verfügbare Ladung – die Summe der Ladungsträger – wird auf der Rückkopplungskapazität eines ladungsempfindlichen Vorverstärkers gesammelt. Daraus resultiert die Übertragung eines dieser Ladung äquivalenten

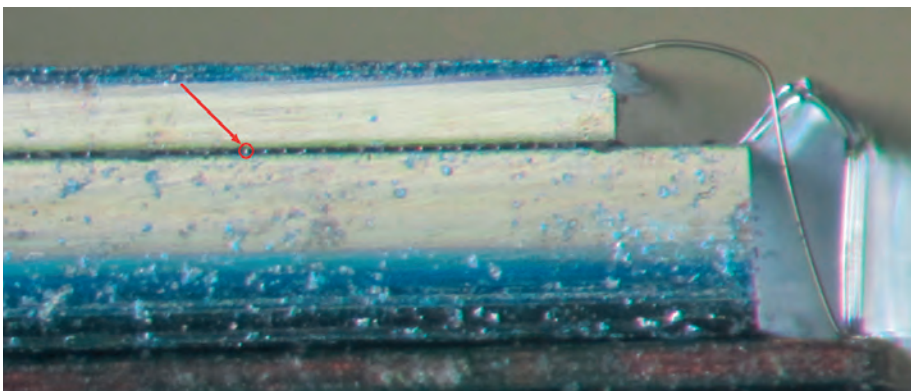


Bild 9.4.16 Ein Röntgendetektor, bestehend aus einer 300 Mikrometer dicken Siliziumsensoreinheit (oben) und einem Auslesechip (unten). Die Pixelgröße beträgt hier 75 Mikrometer mal 75 Mikrometer. Der rote Pfeil markiert eine Indiumlotkugel nach dem Zusammenfügen der zwei Siliziumscheiben. (Paul Scherrer Institut)

Spannungsschritts an den Ausgang. Durch den parallel zur Rückkopplungskapazität geschalteten Widerstand kann sich die Kapazität entladen und ist danach für einen weiteren Messzyklus bereit. Die Höhe des Spannungspulses am Vorverstärker Ausgang ist proportional zur Anzahl der aufsummierten Ladungsträger und somit auch zur Energie des eingefangenen, absorbierten Photons. Durch den Vergleich der Höhe des Spannungspulses am Ausgang des Vorverstärkers mit einem einstellbaren Schwellenwert ist man nun in der Lage, Photonen ab einer bestimmten Energie zur Weiterverarbeitung auszuwählen. Dabei werden alle Spannungspulse, die die Schwellenspannung überschreiten, registriert und einem Zähler zugeführt. Alle eintreffenden Spannungspulse, die die Schwellenspannung nicht erreichen, werden ignoriert.

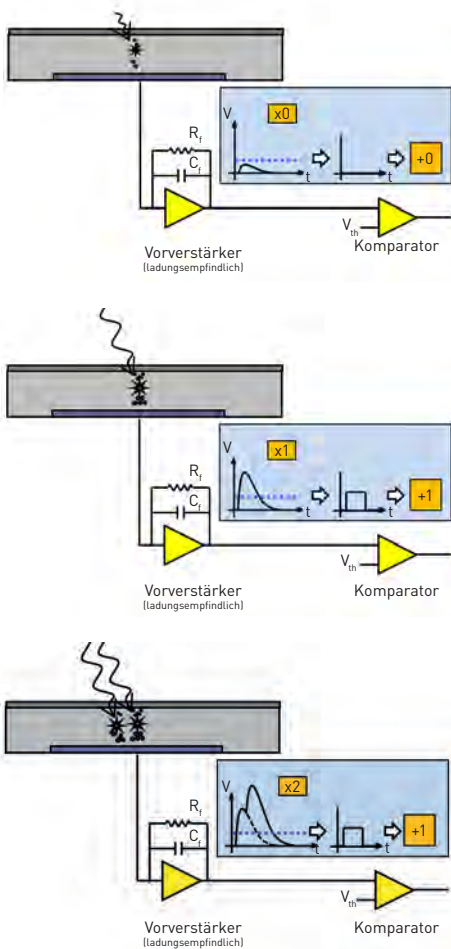


Bild 9.4.17 Prinzipskizze eines Sensor-Pixels mit einer Einzelphotonen zählenden Ausleseelektronik:

(oben) keine eintreffenden Photonen bzw. ein einfallendes Photon mit einer Energieabgabe unterhalb der Detektionsschwelle;
 (Mitte) ein einzelnes Photon wird detektiert;
 (unten) zwei zeitgleich eintreffende Photonen führen zu nur einem «auswertbaren Zählimpuls». (Paul Scherrer Institut)

Eine solchermassen direkt digitalisierende und zählende Ausleseelektronik hat viele Vorteile. Beispielsweise bietet sie die Möglichkeit der rauschfreien Registrierung einzelner Photonen. In einem Halbleiter gibt es grundsätzlich immer eine bestimmte Anzahl frei verfügbarer Ladungsträger, die eine charakteristische Temperaturabhängigkeit zeigt. Diese Ladungsträger werden ebenfalls durch das elektrische Feld zur Ausleseelektronik transportiert und erzeugen hier statistisch schwankende Signalamplituden, das sogenannte «Eigenrauschen». Der Komparator erlaubt es, die Schaltschwelle über dieses Rauschniveau zu setzen und somit nur Signale weiterzugeben, die über diesem sogenannten intrinsischen Rauschniveau liegen. Ein weiterer Pluspunkt liegt in der Möglichkeit einer relativ einfachen weiteren Informationsverarbeitung, da die Signale bereits nach dem Komparator in digitaler Form vorliegen.

Als Einschränkung ist hier zu beachten, dass die Energieinformation nur teilweise ausgewertet werden kann, da lediglich Photonen ab einer bestimmten minimalen Energie registriert werden können.

Eine andere Art, die gesammelten Ladungsträger im Auslesechip weiterzuverarbeiten, ist die Implementation einer rein ladungsintegrierenden Ausleseelektronik, welche die zuvor genannten Nachteile vermeidet. Hier werden wie bei der Einzelphoton zählenden Variante die eintreffenden Ladungsträger auf der Rückkopplungskapazität eines ladungsempfindlichen Vorverstärkers gesammelt. Allerdings ist in diesem Falle kein Entladewiderstand parallel geschaltet, sodass sich durch die Ladung eines jeden weiteren Elementarereignisses die Spannung über der Rückkopplungskapazität schrittweise erhöhen kann. Diese Spannungsstufen sind ebenfalls einzeln proportional zur Energie der im Sensorpixel absorbierten Photonen.

Der Vorteil dieser Implementation besteht darin, dass damit im Prinzip die Energie jedes einzelnen Photons bestimmt werden kann. Beim Einsatz monoenergetischer Photonen, wie es bei einer Synchrotronquelle oder bei einem freien Elektronenlaser häufig der Fall ist, kann durch die Kenntnis der resultierenden Pulshöhe eines einzelnen Photons auf die Anzahl der insgesamt absorbierten Photonen geschlossen werden.

Jede Art der Signalaufbereitung und -verarbeitung hat spezifische Vor- und Nachteile. Daher ist es notwendig, den vorgesehenen Einsatz und die entsprechenden Anforderungen genauestens zu kennen, um jeweils einen möglichst idealen Detektor massschneidern zu können.