

Hamburger Synchrotronstrahlungslabor HASLAB

Leiter: J.R. Schneider, DESY

Gemeinsam mit 250 Gästen aus aller Welt, die von Albrecht Wagner begrüßt wurden, feierte DESY am 19. Mai 2004 40 Jahre Forschung mit Synchrotronstrahlung bei DESY in Hamburg. Dieses Jubiläum fiel mit dem 80. Geburtstag von Professor Peter Stähelin zusammen, dem damaligen Forschungsdirektor von DESY. Er hatte als Erster die experimentellen Nutzungsmöglichkeiten der Synchrotronstrahlung erkannt, die in den Ablenkmagneten des damals neuen 6 GeV-Elektronensynchrotrons DESY erzeugt wurde. Unter den Vortragenden des Kolloquiums fanden sich einige Pioniere der Forschung mit Synchrotronstrahlung in Hamburg: Ruprecht Haensel, Wulf Steinmann, Taizo Sasaki, Gerd Rosenbaum, Christof Kunz und Wolfgang Eberhardt. Sie fesselten das Publikum mit Berichten über die allererste Zeit und die mit großer Begeisterung verfolgte parasitären Nutzung der auf- und abflackernden Strahlung aus den Teilchenphysikmaschinen – die im krassen Gegensatz zu der erwarteten Leistung der Speicherringanlage PETRA III steht, wie sie von Edgar Weckert vorgestellt wurde.

Mit der Nutzereinrichtung VUV-FEL, die Josef Feldhaus beschrieb, treibt DESY die Forschung mit Freie-Elektronen-Lasern voran. Der Nutzerbetrieb wird im April 2005 beginnen – und man darf gespannt sein, was für Geschichten die Pioniere in 40 Jahren erzählen werden. Die geplante europäische Röntgenlaseranlage XFEL wurde von Jochen Schneider vorgestellt. Mit dieser Art von Strahlungsquelle wird es erstmals möglich sein, neue Materiezustände direkt auf atomarer Längen- und Zeitskala zu untersuchen. Entsprechend hoch sind die Erwartungen der wissenschaftlichen Gemeinschaft. Der Generaldirektor der Europäischen Synchrotronstrahlungseinrichtung ESRF in Grenoble, William G. Sterling, überbrachte die Glückwünsche des weltweit führenden Partnerinstituts. Alle neuen Projekte lassen sich nur mit starker Unter-



Abbildung 79: Feier von 40 Jahren Forschung mit Synchrotronstrahlung bei DESY: Vielen Dank an Professor Peter Stähelin anlässlich seines 80. Geburtstags, für die Förderung der Forschung mit Synchrotronstrahlung bei DESY. (Von links nach rechts: A. Wagner, B. Sonntag (Univ. Hamburg), J.R. Schneider und Peter Stähelin.)

stützung der Öffentlichkeit und der Politik realisieren. Die ermutigenden Ansprachen von Dr. Jörg Dräger, Wissenschafts- und Gesundheitssenator der Stadt Hamburg, und Ministerialdirektor Dr. Hermann Schunck, Leiter des Geschäftsbereichs Forschung, Verkehr und Raumfahrt am Bundesministerium für Bildung und Forschung BMBF, waren deshalb sehr willkommen. Die 40-Jahr-Feier der Forschung mit Synchrotronstrahlung in Hamburg spannte sehr schön den Bogen von der Pionierarbeit mit Synchrotronstrahlung bis hin zu den ersten Tagen der Forschung mit Freie-Elektronen Lasern bei DESY. Während des Empfangs und der abendlichen Feier fanden dementsprechend zahlreiche anregende Diskussionen statt.

Nach intensiver Vorbereitung im Jahr 2003 und mit Unterstützung des Erweiterten Wissenschaftlichen Rats (EWR) und des Machine Advisory Committee (MAC) stellte DESY seine Forschungsprogramme für die Zeit von 2005 bis 2009 der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren (HGF) zur strategischen Begutachtung vor. Im Rahmen des Forschungsbereichs Struktur der Materie nimmt DESY an drei Programmen teil:

- Elementarteilchenphysik
- Astroteilchenphysik und
- Großgeräte für die Forschung mit Photonen, Neutronen und Ionen (PNI)

Die Ergebnisse der Evaluierung aller drei Programme durch hochrangige internationale Gutachtergremien waren sehr gut, die Forschung mit Photonen bei DESY erzielte die höchstmögliche Wertung. Der Senat der Helmholtz-Gemeinschaft folgte den Empfehlungen der Gutachter, die wie folgt zusammengefasst wurden:

„Das PNI-Programm ist das Flaggschiff der Helmholtz-Gemeinschaft hinsichtlich ihrer Mission, Großgeräte als Nutzeranlagen zu planen und zu betreiben. Der Gutachterausschuss kommt zu dem Gesamturteil, dass das PNI-Programm der Helmholtz-Gemeinschaft wirklich herausragend ist, insbesondere, da es sich um ein Programm auf nationaler Basis und nicht etwa ein internationales Programm handelt. Der Gutachterausschuss ist beeindruckt von den in der Helmholtz-Gemeinschaft gebotenen Forschungsmöglichkeiten und der hohen Leistung, die an diesen Anlagen erbracht wird. Die wissenschaftliche Qualität der an den Anlagen durchgeführten und von ihnen ermöglichten Forschung ist ebenso herausragend wie die Unterstützung der Nutzer.

Die Photonenquellen, die von DESY entweder entwickelt oder vorgeschlagen werden, sind die spannendsten Projekte im Programmenthema ‚Photonen‘. Dies verspricht, Deutschland, der Helmholtz-Gemeinschaft und DESY eine weltweit führende Position zu eröffnen.

Die Entwicklung von PETRA III wird mittelfristig eine detaillierte Begutachtung der zukünftigen Rolle von DORIS III erfordern, d. h. im Jahr 2007.“

Der Gutachterausschuss empfahl außerdem nachdrücklich, die hausinterne Forschung mit Photonen durch das vorgeschlagene Zentrum für XFEL Wissenschaften zu stärken, das als ein Ankerpunkt für die Vorbereitung der wissenschaftlichen Programme am VUV-FEL und dem geplanten europäischen XFEL Röntgenlaserlabor dienen wird. Das Zentrum wird zudem die notwendigen F&E Programme für Undulatoren, Strahlführungen, Instrumentierung, Detektoren und Datenverarbeitung koordinieren.

Als Folge der Evaluierung durch die HGF wird DESY zwei weitere Stellen für Leitende Wissenschaftler (C4) im Bereich der Forschung mit Photonen ausschreiben und die Anzahl der Mitarbeiter in der hausinternen Forschung von heute 15 auf etwa 90 Stellen im Jahr 2009 erhöhen. Durch Zusammenlegung von Ressourcen aus den Bereichen Forschung mit Photonen und Teilchenphysik wird DESY eine starke hausinterne Gruppe für die Detektorentwicklung aufbauen, und außerdem intensiv mit Detektorgruppen an Universitäten und anderen Forschungszentren kooperieren.

Der HGF-Senat bewilligte die von DESY vorgeschlagene Ressourcenverteilung auf die drei Programme. Abbildung 80 zeigt die Verteilung der finanziellen Mittel für die hausinterne Forschung und die Forschungsanlagen im Bereich der Teilchenphysik und der Forschung mit Photonen. Die Ressourcen für Infrastruktur in Höhe von etwa 50 Mill. € pro Jahr wurden nicht begutachtet und sind hier nicht dargestellt.

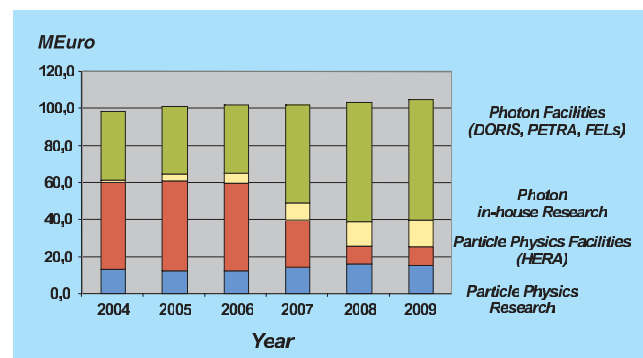


Abbildung 80: Verteilung der Ressourcen für hausinterne Forschung und Anlagen in der Teilchenphysik und der Forschung mit Photonen, wie sie vom Senat der Helmholtz-Gemeinschaft für die Jahre 2005 bis 2009 bewilligt wurde.

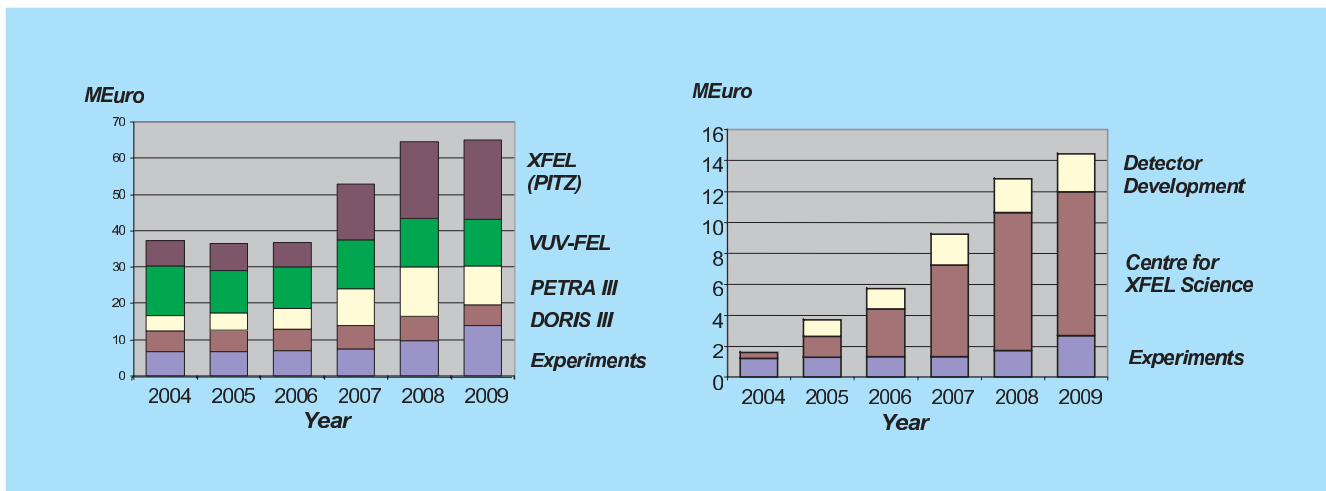


Abbildung 81: Für Photonenanlagen und hausinterne Forschung mit Photonen bei DESY zur Verfügung stehende Ressourcen.

stellt. Die für die Forschung in der Teilchenphysik vorgesehenen finanziellen Mittel werden im Jahr 2007 leicht erhöht, um DESYs Beteiligung an den Vorbereitungen für den Internationalen Linear Collider (ILC) zu verstärken. Das Physikprogramm an HERA II kommt 2007 zum Abschluss, weshalb die Ressourcen für die Teilchenphysikanlagen entsprechend abnehmen. Aufgrund von DESYs Verpflichtungen mit PETRA III und der europäischen XFEL Anlage steigt andererseits im Jahr 2007 die Finanzierung für die Photonquellen, die Ressourcen für die hausinterne Forschung mit Photonen werden deutlich erhöht.

Die linke Seite von Abbildung 81 zeigt die für Photonquellen und hausinterne Forschung mit Photonen zur Verfügung stehenden Ressourcen im Detail. Die Mittel für Experimente beinhalten die Betriebs- und Ausbauskosten der Photonstrahlführungen an DORIS III, dem VUV-FEL und PETRA III. Die restlichen Mittel werden benötigt, um DORIS III und den VUV-FEL zu betreiben und weiterzuentwickeln, sowie als Beteiligung von DESYs institutioneller Finanzierung an der Realisierung der Projekte PETRA III und dem europäischen XFEL Labor. Die rechte Seite von Abbildung 81 zeigt die Verteilung der Mittel, die für die hausinterne Forschung mit Photonen an DORIS III, dem VUV-FEL und PETRA III (Experimente), für das Zentrum für XFEL

Wissenschaften und für die Detektorentwicklung zur Verfügung stehen.

Insgesamt war 2004 ein äußerst erfolgreiches Jahr für die Forschung mit Photonen bei DESY. An DORIS III wurde der neue HARWI-Wiggler installiert, der hochenergetische Synchrotronstrahlung für das von der GKSS betriebene Labor für Materialforschung liefern wird, die Instrumentierung für die Kleinwinkelstreuung wurde modernisiert, ein neuer 10-T Kryomagnet an der Wiggler-Strahlführung BW5 erfolgreich in Betrieb genommen und ein neues, hochauflösendes Röntgen-Fluoreszenzspektrometer an der Strahlführung W1 aufgebaut. Eine sehr erfolgreiche Machbarkeitsstudie zum „Top-up“-Betrieb an DORIS III hat gezeigt, dass dieser Betriebsmodus möglich ist, sobald PETRA III läuft. Dies würde die Strahlstabilität von DORIS III weiter verbessern.

Im Jahr 2004 lieferte DORIS III 4781 Stunden planmäßiger dedizierter Messzeit für Nutzer bei einer Betriebseffizienz von 93.1%. Für Experimente, die eine spezielle Zeitstruktur benötigen, wurde der Speicherring während etwa 8% der Betriebszeit mit reduzierter Bunchanzahl betrieben. Im Sommer war eine Betriebsunterbrechung von 12 Wochen notwendig, um verschiedene Arbeiten zur Verbesserung der Strahlstabilität durchzuführen und den neuen HARWI-Wiggler

zu installieren. Der Betrieb von PETRA II als Synchrotronstrahlungsquelle war auf etwa 630 Stunden begrenzt.

Der technische Projektvorschlag (TDR-*Technical Design Report*) für PETRA III wurde im Februar 2004 veröffentlicht. Am 25. November 2004 gab das Bundesministerium für Bildung und Forschung BMBF grünes Licht für den Baubeginn der Anlage. PETRA III wird den Nutzern ab 2009 zur Verfügung stehen.

Über ein Jahr lang wurde der FEL an der TESLA-Testanlage (TTF) umgebaut und zur VUV-FEL Nutzereinrichtung ausgebaut, die einen leuchtstarken und hochbrillanten Photonenstrahl mit einer Wellenlänge zwischen 6 und 120 nm liefern wird. Am 13. Dezember 2004 konnte die erste spontane Undulatorstrahlung beobachtet und charakterisiert werden. Die Aufnahme des ersten VUV-FEL Nutzerbetriebes ist für Mai 2005 geplant.

Bedeutende Fortschritte wurden auf dem Weg zur geplanten europäischen XFEL Röntgenlaseranlage in Hamburg gemacht: Acht europäische Staaten unterzeichneten ein „*Memorandum of Understanding*“ für die Vorbereitungsphase des XFEL, und eine Experten-Gruppe mit Mitgliedern aus elf europäischen Ländern bereite einen Zwischenbericht über die wissenschaftlichen und technischen Aspekte der XFEL Anlage vor. Bei DESY wurde eine Projektgruppe gebildet, die für insgesamt 37 Arbeitspakete zuständig ist. Sie erstellt auch die Unterlagen für das Planfeststellungsverfahren, die im März 2005 fertig sein werden. Im Dezember 2004 unterzeichneten die Universität Uppsala, die Universität Stockholm, das königliche Institut für Technologie (KTH) und DESY eine Absichtserklärung (*Letter of Intent*) zur Zusammenarbeit im Bereich der technischen und wissenschaftlichen Entwicklungen für die Forschung mit Freie-Elektronen-Lasern.

Die Unterstützung der Forschung mit Photonen bei DESY durch das Programm der Verbundforschung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung BMBF und durch die Europäische Union im Rahmen der „Integrierten Initiative (I3) zu Synchrotrons und FELs“ und der „Europäischen FEL Designstudie (EUROFEL)“ schätzt DESY sehr. EUROFEL beinhaltet Aktivitäten von allen 13 europäischen Laboratorien, die derzeit an F&E für Freie-Elektronen-Laser interessiert sind. Das Projekt wird von DESY koordiniert.

Die im Jahr 2004 erzielten Erfolge waren nur möglich dank der hohen Motivation der HASYLAB- und FS-Mitarbeiter und -Mitarbeiterinnen, aller Kollegen bei DESY und der verschiedenen Außenstationen bei DORIS. Die Zusammenarbeit mit unseren Nutzern und deren starkes Engagement für die Forschungseinrichtung sind entscheidend für den Erfolg des Labors und werden von uns hoch geschätzt. Gemeinsam sehen wir faszinierenden Zeiten für die Forschung mit Photonen bei DESY entgegen.

Spektroskopische Identifizierung von katalytisch aktiven Spezies in überkritischem Kohlendioxid

Die Anwendung überkritischer Fluide in der Katalyse ist ein viel versprechender Ansatz, um Reaktionen effizienter und selektiver durchzuführen [3,4]. In der Nähe des kritischen Punktes können Dichte und Viskosität über weite Bereiche variiert werden, mit diesen Größen verknüpft sind auch Solvationsvermögen und Transporteigenschaften. Zudem lassen sich gas-flüssig Reaktionen im Idealfall in eine einzige überkritische Phase überführen. Besonders attraktiv ist die Verwendung eines heterogenen Katalysators in der Form eines Feststoffes. So ist das Produktgemisch leicht vom Katalysator abtrennbar, und der Prozess kann in einem kontinuierlichen Verfahren durchgeführt werden. Grunwaldt et al. [1,2] haben beispielsweise kürzlich entdeckt, dass die selektive Oxidation von Benzylalkohol zu Benzaldehyd sehr gut in überkritischem Kohlendioxid mittels eines Palladiumkatalysators ($\text{PdO}_x/\text{Al}_2\text{O}_3$) durchgeführt werden kann – wobei die Reaktionsgeschwindigkeit etwa 20–100 Mal höher als in konventionellen Lösungsmitteln ist [2].

Obwohl in einer Reihe von Reaktionen in überkritischem Kohlendioxid höhere Reaktionsraten als in konventionellen Lösungsmitteln gefunden wurden, gibt es kaum Untersuchungen, die auf ein besseres fundamentales Verständnis solcher Reaktionen abzielen [5]. Neben in situ Beobachtungen des Phasenverhaltens ist vor allem die Charakterisierung des Feststoffkatalysators ein wichtiger Aspekt. Die notwendigen spek-

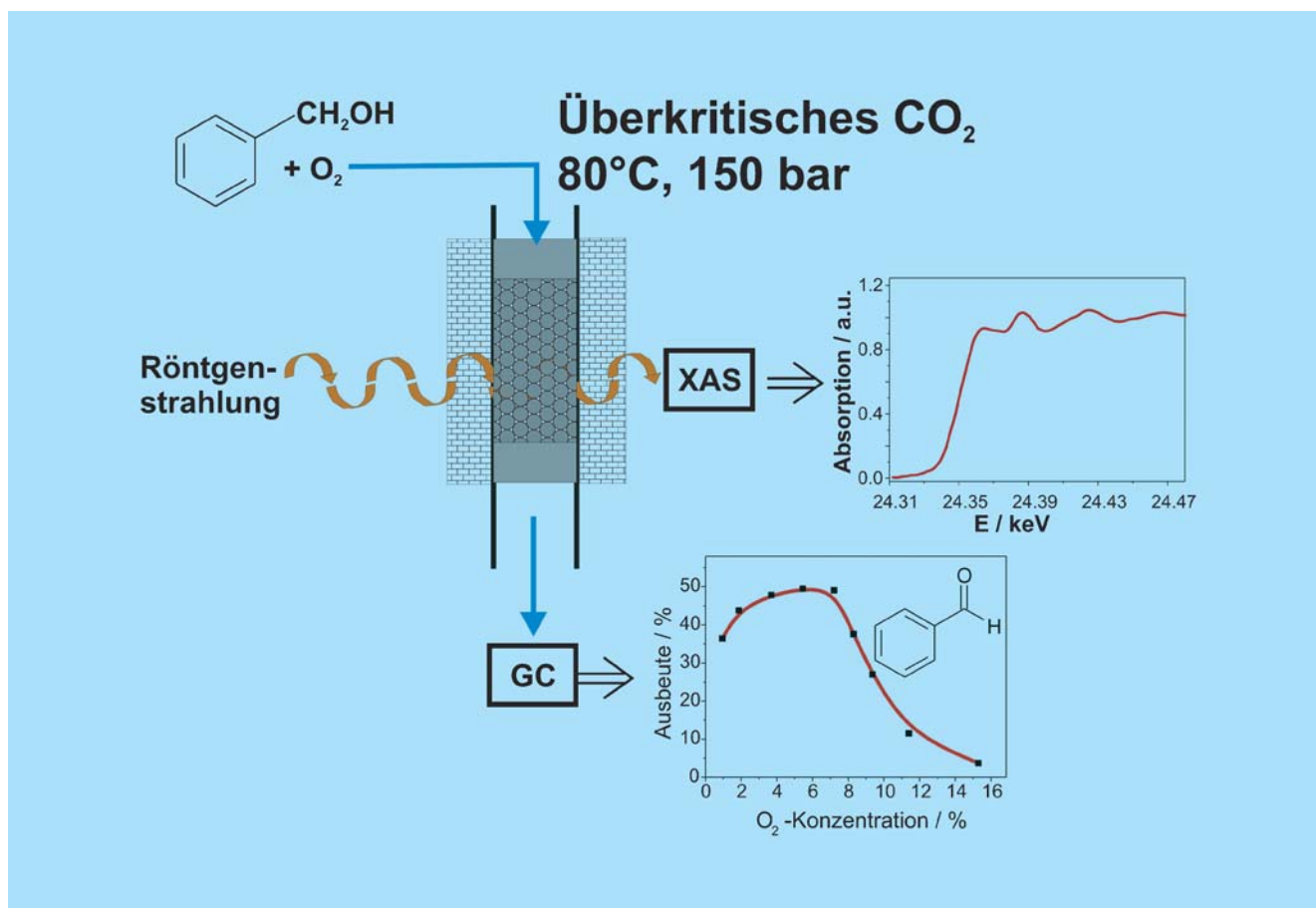


Abbildung 82: Die Oxidation von Benzylalkohol zu Benzaldehyd mit molekularem Sauerstoff in überkritischem Kohlendioxid über einem Pd/Al₂O₃-Katalysator und das Prinzip der gleichzeitigen Bestimmung der Struktur des eingesetzten Katalysators und dessen katalytischen Aktivität, um Einblick in den Mechanismus und die aktiven Zentren zu erhalten.

trokopischen in situ Messungen bei erhöhtem Druck sind auf wenige Methoden limitiert. Neben Infrarot-Spektroskopie ist vor allem die Röntgenabsorptionsspektroskopie (X-ray absorption spectroscopy, XAS) aufschlussreich. In der vorliegenden Arbeit ist es erstmals gelungen, wertvolle strukturelle Information über einen Feststoffkatalysator während der Reaktion in überkritischem Kohlendioxid zu erhalten, wie es in Abbildung 82 gezeigt ist [1,2,6].

Als Modellreaktion wurde die selektive Oxidation von Benzylalkohol zu Benzaldehyd mit molekularem Sauerstoff über Pd/Al₂O₃ gewählt. Ziel der Messungen war, den Oxidationszustand der fein dispergierten Palladiumpartikeln auf Aluminiumoxid als Träger zu er-

mitteln. In Laborversuchen wurde weiterhin folgende wichtige Beobachtung gemacht: Die Reaktionsrate der selektiven Benzylalkohol-Oxidation zeigte eine charakteristische Abhängigkeit von der Sauerstoffkonzentration mit einem Maximum bei 6 mol% Sauerstoff. Eine Erklärung für das Auftreten eines Maximums ist: Metallisches Palladium dehydriert den Alkohol zum Aldehyd; ist die Sauerstoffkonzentration zu hoch, werden die Palladiumpartikel oxidiert, was zu einer Herabsetzung der Aktivität führt. Um diese Hypothese zu bestätigen, wurden Struktur-Aktivitäts-Beziehungen untersucht. Ziel war es, spektroskopische Information (XAS) während der katalytischen Reaktion (katalytische Aktivität bestimmt durch gaschromatographische Produktanalyse) zu erhalten.

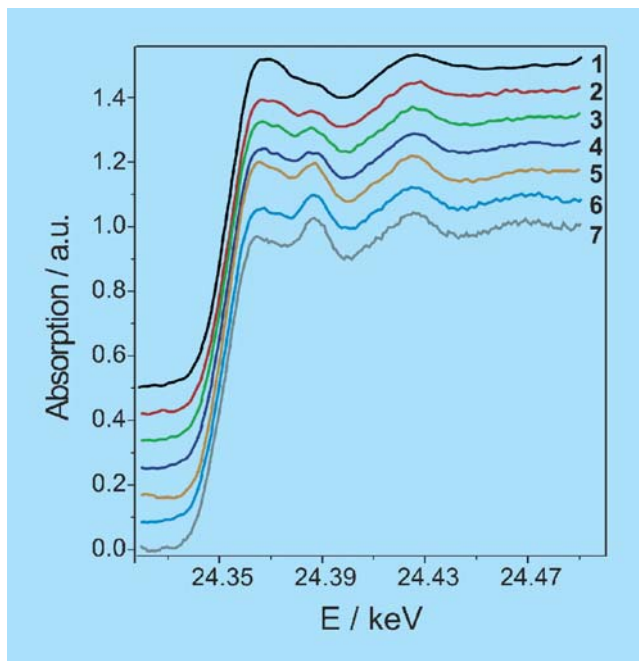


Abbildung 83: Röntgenabsorptions-Spektren während der Reduktion des 0.5% Pd/Al₂O₃-Katalysators in überkritischem Kohlendioxid durch Benzylalkohol: (1) der an Luft oxidierte Katalysator; (2) Start des Benzylalkohol-Zustroms; (3) 6 min; (4) 12 min; (5) 24 min; (6) 30 min; (7) 48 min Reduktion durch den Alkohol (Bedingungen: 80°C, 150 bar, 0.002 mol/min Alkohol, 0.3 g Katalysator).

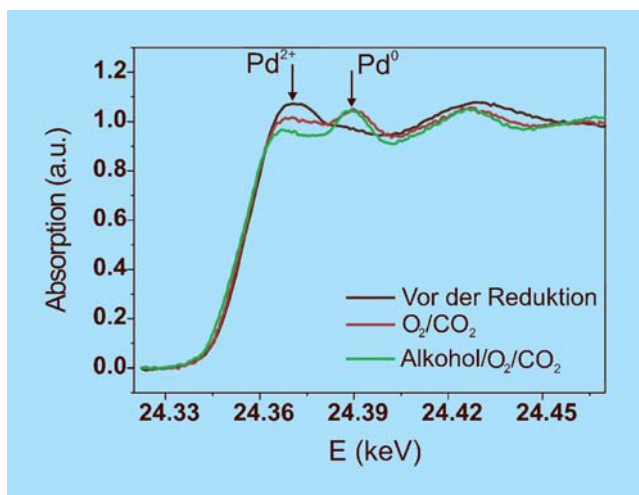


Abbildung 84: Ausgewählte Röntgenabsorptions-Spektren des 0.5% Pd/Al₂O₃-Katalysators vor der Reduktion, in 1.9% Benzylalkohol/1.9% O₂/scCO₂ und 1.9% O₂/scCO₂.

Dazu wurde eine in situ Zelle entwickelt, deren Prinzip in Abbildung 82 gezeigt ist und die zugleich als katalytischer Reaktor und als spektroskopische Zelle dient. Für Röntgenlicht durchlässige Berylliumfenster erlauben die Aufnahme von Röntgenabsorptionsspektren. Da die Zelle im kontinuierlichen Betrieb arbeitet, kann gleichzeitig die katalytische Aktivität für die Benzylalkohol-Oxidation bestimmt werden. Dazu wurden die experimentellen Bedingungen so nah wie möglich an diejenigen im Labor an der ETH Zürich angepasst. Aus Sicherheitsgründen wurde aber das Volumen der spektroskopischen Zelle so klein wie möglich gewählt (ca. 0.5 ml). Wie beim Laborexperiment wurde flüssiges Kohlendioxid mit einem Kompressor, der Alkohol über eine Flüssigkeitspumpe und der Sauerstoff mittels eines Dosierventils zugegeben [1]. Das Experiment wurde an der Beamline X1 am ROEMO II (HASYLAB/DESY) realisiert.

Im ersten Schritt wurde der an Luftsauerstoff oxidierte Katalysator unter Reaktionsbedingungen (80°C, 150 bar) ausschliesslich mit dem Alkohol in überkritischem Kohlendioxid untersucht. Die in Abbildung 83 gezeigten Spektren weisen auf eine Reduktion des Palladiums hin, da die Whiteline bei 24.36 keV abnimmt und die Schulter bei 24.39 keV zunimmt. Kürzlich durchgeführte EXAFS-Messungen untermauern diese Beobachtungen.

Dann wurde der PdO_x/Al₂O₃-Katalysator unter Reaktionsbedingungen mit optimalem Sauerstoff/Alkohol-Verhältnis untersucht. Einige Resultate sind in Abbildung 84 und Tab. 1 gezeigt. Das Palladium war unter Reaktionsbedingungen überwiegend reduziert (1.9 mol% Benzylalkohol, 0.95 mol% O₂, in überkritischem Kohlendioxid). Die Rekonstruktion der Spektren durch Linearkombination aus Pd²⁺- und Pd⁰-Referenzspektren zeigte, dass die Palladiumpartikel anders als bei der Alkohol-Oxidation in der flüssigen Phase partiell oxidiert waren. Die Reaktionsrate war mit 1480 mol_{alc} mol_{Pd}⁻¹ h⁻¹ ähnlich hoch wie im Laborexperiment und stieg mit zunehmender Sauerstoffkonzentration wie erwartet weiter an (Tab. 1). Beim Wechsel auf 1.9% O₂/scCO₂ ohne Benzylalkohol wurde das Palladium weiter oxidiert. Zudem zeigte sich auch ein markanter Einfluss auf die Aktivität: Als wieder zurück auf das Reaktionsgemisch 1.9 mol% Benzylalkohol/1.9 mol% O₂ in überkritischem Kohlendioxid gewechselt wurde, war die Aktivität zunächst

Experimentelle Bedingungen (in scCO ₂)	Alkohol=0% O ₂ = 0% (nach Reduktion)	Alkohol=1.9% O ₂ = 0.95%	Alkohol=1.9% O ₂ =1.9%	Alkohol=0% O ₂ =1.9%	Alkohol=1.9% O ₂ =1.9%
Reaktionsrate (h ⁻¹)	–	1480	1890	–	1280
Selektivität (%)	–	96.3	95.7	–	94.4
Relatives Pd ⁰ /Pd ²⁺ Verhältnis	0.92/0.08	0.87/0.13	0.86/0.14	0.67/0.33	0.77/0.23

Tabelle 1: Katalytische und XAS-Ergebnisse der aeroben Oxidation von Benzylalkohol in überkritischem Kohlendioxid bei 150 bar und 80°C (Prinzip, siehe Abb. 82). Das relative Pd⁰/Pd²⁺ Verhältnis wurde durch Linearkombination von XANES-Referenzspektren bestimmt, die katalytische Aktivität durch GC-Analyse (Details, vergl. [1]).

kleiner und der Anteil an oxidiertem Palladium größer als vor der Oxidation in 1.9% O₂/scCO₂. Mit der Zeit fand eine Reaktivierung des Katalysators statt, was auch in Laborexperimenten bestätigt wurde.

Dies legt nahe, dass metallisches Palladium essentiell für die Oxidation des Alkohols ist und die Präsenz von zu viel Sauerstoff zu einer „Überoxidation“ der Palladi-

umpartikel führt. Abbildung 85 zeigt ein vereinfachtes Modell für dieses Verhalten. Neben der ungünstigeren Lage des chemischen Gleichgewichts wird bei niedriger Sauerstoffkonzentration die Reaktion dadurch verlangsamt, dass sich der bei der Dehydrierung gebildete Wasserstoff in den Palladiumpartikeln anreichert und die aktive Oberfläche belegt. Bei höheren Sauerstoffkonzentrationen wird der Wasserstoff schneller oxidiert

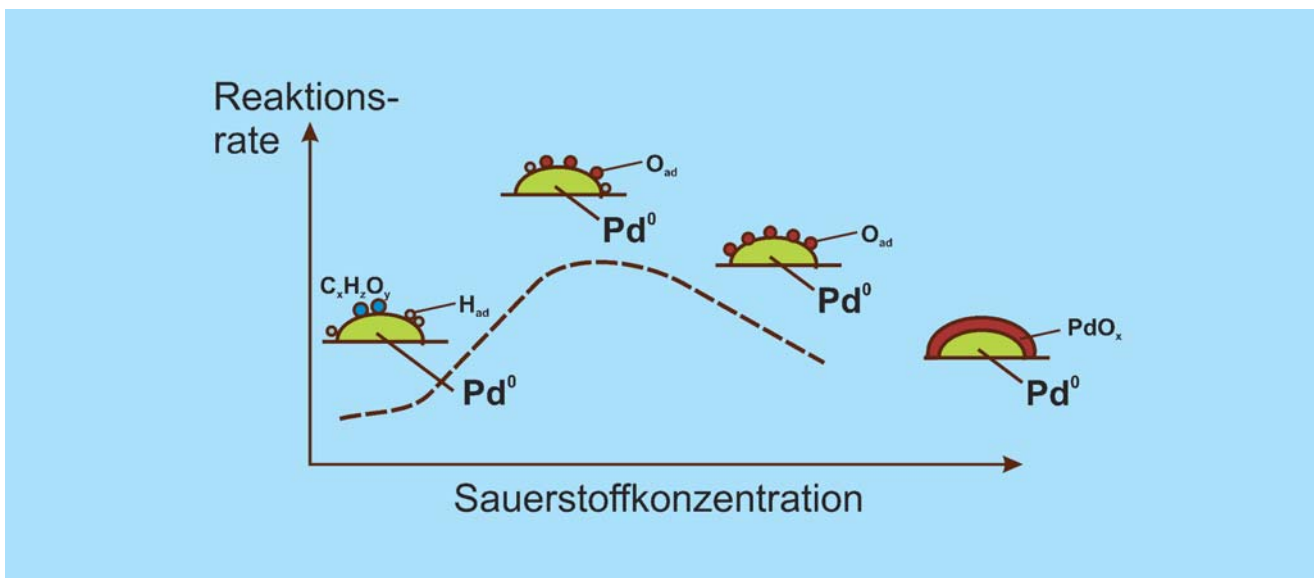


Abbildung 85: Modell für die beobachteten Struktur-Aktivitäts-Relationen während der Palladium-katalysierten Oxidation von Benzylalkohol in überkritischem Kohlendioxid.

und damit entfernt. Deshalb ist die Oxidation des Alkohols bei höheren Sauerstoffkonzentrationen begünstigt. Wahrscheinlich verursacht die höhere Sauerstoffkonzentration auch eine vermehrte Oxidation organischer Verunreinigung auf der Katalysatoroberfläche und bewirkt dadurch deren Entfernung. Bei einer zu hohen Sauerstoffkonzentration führt jedoch die Oxidation der Oberfläche der Palladiumpartikel zu einer Deaktivierung. Die Studie zeigt, dass selbst unter den drastischen Bedingungen, wie sie überkritische Fluide erfordern, in situ Messungen an einem heterogenen Katalysator möglich sind und Struktur-Aktivitäts-Beziehungen Einblicke in die Wirkungsweise des Katalysators geben können.

Literatur:

- [1] J.-D. Grunwaldt, M. Caravati, M. Ramin, and A. Baiker, *Catal. Lett.*, 90 (2003) 221.
- [2] M. Caravati, J.-D. Grunwaldt, and A. Baiker, *Catal. Today*, 91-92 (2004) 1.
- [3] A. Baiker, *Chem. Rev.*, 99 (1999) 453.
- [4] P. G. Jessop, T. Ikariya, and R. Noyori, *Chem. Rev.*, 99 (1999) 475.
- [5] J.-D. Grunwaldt, R. Wandeler, A. Baiker, *Catal. Rev. Sci. Eng.* 45 (2003) 1.
- [6] J.-D. Grunwaldt, M. Caravati, M. Ramin, and A. Baiker, *HASYLAB Highlight Research Report, Newsletter 08-2004* (2004).

Status des VUV-FEL

Eine Zusammenfassung der Arbeiten zum VUV-FEL ist auf Seite 195 (M-Bereich) zu finden.

Status des PETRA III Projekts

Ein wichtiges Ereignis im Jahr 2004 war die Fertigstellung des technischen Projektvorschlags (*Technical Design Report*, TDR) für PETRA III. Insgesamt trugen 208 Autoren aus 65 Institutionen weltweit zu dem 544 Seiten starken Bericht bei. Der TDR wurde Ende Februar 2004 veröffentlicht, siehe <http://www-hasyllab.desy.de/facility/>

[upgrade/petra_tdr.htm](http://www-hasyllab.desy.de/facility/upgrade/petra_tdr.htm). Die Kurzfassung (*executive summary*) des TDR, die einen allgemeinen Überblick über das gesamte Projekt bietet, wurde außerdem als separates Dokument im Internet veröffentlicht. Der TDR selbst beschreibt im Detail den Ausbau des PETRA-Speicherrings zu einer Maschine mit einer außergewöhnlich niedrigen Emittanz von 1 nmrad. Nach einem Überblick über verschiedene Arten von Undulatoren, die speziell für den Betrieb an PETRA III optimiert sind, werden mögliche Strahlführungen und Messplätze vorgeschlagen. Der Bericht schließt mit Ausführungen zu Bau, Projektkosten, Personal und Management.

Der neue Oktant des PETRA III Speicherrings beinhaltet neun gerade Abschnitte für Undulatoren. Jeder gerade Abschnitt kann entweder mit einem einzelnen, 5 m langen Undulator ausgerüstet werden, oder mit zwei 2 m langen Undulatoren, die gegeneinander um 5 mrad verkantet sind. Besonders hervorzuheben ist ein spezieller, 20 m langer Undulator für Experimente, die einen besonders hohen Photonenfluss benötigen, wie unelastische Röntgenstreuung und Kernresonanzstreuung. Das derzeitige Design der Anlage sieht 13 Strahlführungen an unabhängigen Undulatoren vor. Sieben dieser Strahlführungen werden von DESY gebaut und betrieben, alle anderen werden von externen Institutionen wie EMBL, GKSS und MPG gebaut oder finanziert.

Der TDR enthält insgesamt 22 Vorschläge für Strahlführungen. Da nur 13 unabhängige Undulatoren zur Verfügung stehen, muss auf der Basis der Vorschläge im TDR eine Auswahl getroffen werden. Diese Aufgabe wurde an ein Auswahlgremium übergeben, das die Strahlführungsvorschläge begutachten und eine Empfehlung aussprechen sollte. Dieses Komitee unter der Leitung von Prof. Friso van der Veen (*Swiss Light Source*) setzte sich aus 20 Experten von verschiedenen Universitäten, Forschungseinrichtungen und Synchrotronstrahlungsanlagen zusammen. Um eine offene Diskussion zwischen den Vorschlagenden und dem Komitee zu erleichtern, wurde am 9.–10. September 2004 ein Workshop abgehalten, in dem die wissenschaftlichen Hintergründe und technischen Aspekte der möglichen Strahlführungen und Messplätze vorgestellt wurden.

Das Komitee gab seinen Bericht im Oktober 2004 ab. Obwohl im derzeitigen Stadium noch keine genauen

Details angegeben werden können, kamen die Gutachter insgesamt zu dem Schluss, dass der TDR in seiner vorgestellten Form Spitzenforschung beschreibt, die durch die extrem niedrige Emittanz der Maschine möglich gemacht wird. Die meisten der vorgeschlagenen Strahlführungen werden direkt von der besseren Emittanz von PETRA III profitieren.

Die Empfehlungen bezüglich der Strahlführungsauswahl an PETRA III werden derzeit vom *Photon Science Committee* (PSC) von DESY evaluiert. Eine endgültige Entscheidung zur Auswahl der Strahlführungen sollte Anfang 2005 erfolgen.

Die planmäßige Entwicklung des gesamten Projekts erfordert eine entsprechende Organisation und ein entsprechendes Projektmanagement. Zu diesem Zweck wurde das PETRA III Projekt in drei Hauptzweige gegliedert, den Beschleuniger, die Experimente und die Gebäude. Jeder dieser Zweige ist wiederum in Arbeitspakete untergliedert, deren Leiter größtenteils bereits ausgewählt wurden.

Der Status des PETRA III Umbaus und die Organisationsstruktur können über die kürzlich eingerichtete Webseite des Projekts verfolgt werden (siehe <http://petra3.desy.de/>). Hier finden sich

grundlegende Informationen über die Ziele der Arbeitspakete sowie aktuelle Neuigkeiten.

Die Forschungs- und Entwicklungsarbeiten für PETRA III haben im Jahr 2004 bereits begonnen. Auf der Beschleunigerseite wurde die Optik der Maschine überarbeitet und verbessert. Für das Orbitstabilisierungssystem wurde ein Konzeptdesign entworfen. Die Konzeption zahlreicher Hardwarekomponenten (Vakuumkammern, Dipole und Sextupole) konnte abgeschlossen werden, erste Prototypen wurden gebaut. Für die Entwicklung der Strahlführungen wird derzeit ein auf flüssigem Stickstoff basierendes Tieftemperaturkühlsystem für erste Tests der Monochromatorkühlung in Betrieb genommen.

Die Besetzung von Stellen für Techniker, Ingenieure und Wissenschaftler für die Vielzahl an Aktivitäten innerhalb des PETRA III Projekts ist angelaufen und wird sich in den nächsten Jahren fortsetzen.

Status des Europäischen Röntgenlaserprojektes XFEL

Eine Zusammenfassung des Standes des Projektes ist auf Seite 199 (M-Bereich) zu finden.