

**Nationale Strategie zur Weiterentwicklung beschleunigerbasierter  
Nutzereinrichtungen für die Forschung mit Photonen und mit hohen  
elektromagnetischen Feldern  
(„Helmholtz Photon Science Roadmap“)**

Sven Kiele, Jan Lüning, Bernd Rech, Sebastian M. Schmidt, Barbara Schramm,  
Christian G. Schroer, Olaf Schwarzkopf, Edgar Weckert

Helmut Dosch, Forschungsbereichs-Koordinator  
Ilja Bohnet, Forschungsbereichs-Beauftragter





# Inhaltsverzeichnis

<b>1 Zusammenfassung</b>	<b>4</b>
<b>2 Relevanz der Photonenquellen für den Forschungs- und Wirtschaftsstandort Deutschland</b>	<b>6</b>
2.1 Preisgekrönte Forschungsleistungen . . . . .	6
2.2 Beiträge zum Innovationsgeschehen . . . . .	9
2.3 Weiterentwicklung der Experimentiertechniken . . . . .	11
<b>3 Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft</b>	<b>12</b>
<b>4 Herausforderungen in der Forschung mit Photonen im 21. Jahrhundert</b>	<b>14</b>
4.1 Gesellschaftlich relevante Forschungsfelder . . . . .	14
4.1.1 Materialforschung . . . . .	14
4.1.2 Lebenswissenschaften . . . . .	15
4.1.3 Erde und Umwelt . . . . .	16
4.1.4 Energietechnologien . . . . .	17
4.1.5 Transport- und Herstellungstechnologie . . . . .	17
4.1.6 Informationstechnologie . . . . .	18
4.2 Zukünftige Anforderungen an international wettbewerbsfähige, beschleunigerbasierte Lichtquellen	19
<b>5 Roadmap für die Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft</b>	<b>21</b>
5.1 Kurzbeschreibung der einzelnen Ausbaumaßnahmen . . . . .	23
5.2 Neue Konzepte für den Nutzerbetrieb . . . . .	26
<b>6 Internationaler Kontext und Leistungsvergleich</b>	<b>27</b>
<b>7 Ausblick</b>	<b>31</b>
<b>Glossar</b>	<b>33</b>

# 1 Zusammenfassung

Unsere Gesellschaft steht heute vor gewaltigen Aufgaben zur Gestaltung unserer Zukunft. Neben der im Jahr 2020 aufgetretenen COVID-19-Pandemie sowie der latenten Gefahr weiterer Pandemien stellt der Klimawandel, dessen Auswirkungen bereits deutlich spürbar sind, eine der größten Herausforderungen für die Menschheit dar. Die Bewältigung dieser drängenden Probleme erfordert neue Technologien und Materialien sowie eine vertiefte Kenntnis über die zugrundeliegenden Mechanismen und Prozesse. Dafür werden analytische Werkzeuge benötigt, die in der Lage sind, die Struktur und Funktion der Materialien auf mikroskopischen bis atomaren Längenskalen zu analysieren. Beispiele für derartige Technologien sind die Entwicklung einer neuen Generation von auf der Nano- bis zur atomaren Ebene strukturierten Materialien für die Energiewirtschaft mit optimierten Eigenschaften, um Beiträge zur Eindämmung des weltweiten Klimawandels zu leisten, oder von Materialien in der Informationstechnik in Bezug auf eine immer höhere Komplexität und Informationsdichte, um deren Chancen in ihrer gesamten Breite nutzen zu können. Als Ausgangspunkt für eine Therapie stellt die Kenntnis der atomaren Struktur und Funktion von Makromolekülen, die für die Vermehrung von Krankheitserregern essenziell sind, die Basis für ein rationelles Design von Wirkstoffen dar, deren herausragende Bedeutung bei der Bekämpfung der COVID-19-Pandemie besonders deutlich geworden ist. Die benötigten Untersuchungsmethoden müssen dabei in der Lage sein, ausgehend von der Analyse relevanter Eigenschaften auf der atomaren Ebene, ein Verständnis von Eigenschaften und Wirkungen auf der makroskopischen Skala zu ermöglichen. Neben der rein statischen Struktur rücken dabei zunehmend dynamische Prozesse und Reaktionen in den Fokus des Interesses sowie Untersuchungen unter realistischen Einsatz-, Prozess- oder Lebensbedingungen.

Zur Lösung dieser Herausforderungen sind die diagnostischen Experimentiertechniken, die durch beschleunigerbasierte Photonenquellen zur Verfügung gestellt werden, unverzichtbare Instrumente der Forschung. Die immer stärker voranschreitende Digitalisierung schafft hier ungeahnte Möglichkeiten und eröffnet neue Wege für die Anwendung dieser Techniken. Alleine in Deutschland nutzen Tausende von Forschenden aus Physik, Chemie, Biologie, Medizin, Material-, Erde- und Umweltwissenschaften, den verschiedensten Richtungen der Ingenieur- und selbst Disziplinen wie den Altertumswissenschaften regelmäßig diese Anlagen. Die Forschenden sind dabei häufig in der Komplexität der jeweiligen Fragestellung angepassten, stark interdisziplinär aufgestellten Kollaborationen organisiert. Sie kommen aus Universitäten, außeruniversitären Forschungsorganisationen (Helmholtz-Gemeinschaft, Leibniz-Gemeinschaft, Max-Planck-Gesellschaft und Fraunhofer-Gesellschaft) und der Industrie, aus Deutschland, dem europäischen und selbst dem außereuropäischen Ausland. Dabei sind manche Wissenschaftsgebiete und industrielle F&E-Aktivitäten, wie beispielsweise die kristallographische Strukturbiologie oder die Katalysatorforschung, nahezu komplett von der Verfügbarkeit dieser Analysetechniken abhängig.

Ein Beitrag zur Lösung der oben genannten Fragestellungen sowohl in der Grundlagenforschung als auch in der angewandten Forschung erfordert generell die Kenntnis verschiedenster physikalischer und chemischer Parameter der zugrundeliegenden Objekte und Prozesse mit möglichst hoher lateraler und/oder zeitlicher Auflösung. In der Biologie, zum Beispiel, sind das die Abbildungen hierarchischer Strukturen ausgehend von Organen, Gewebeproben, Zellen, Bakterien und Viren innerhalb des befallenen Wirtsgewebes bis zu einzelnen Makromolekülen. Ein Beispiel aus den Materialwissenschaften stellt die Bestimmung der atomaren Struktur oder der elektronischen Eigenschaften neuer multifunktionaler Materialien dar, die auf der Nanoskala gezielt so aufgebaut werden, dass neuartige makroskopische Eigenschaften erzielt werden. Für die effektive Analyse derartiger Proben und Materialien werden intensive und extrem fokussierbare Photonenstrahlen benötigt, wie sie derzeit nicht zur Verfügung stehen. Um diesen dringenden Bedarf zu erfüllen, ist eine Modernisierung der in Deutschland innerhalb der Helmholtz-Gemeinschaft betriebenen, komplementären beschleunigerbasierten Photonenquellen notwendig. Dies wird auch vom Komitee Forschung mit Synchrotronstrahlung (KFS) – der von der deutschen Nutzergemeinde gewählten

Interessenvertretung – nachdrücklich in seiner im Jahr 2020 veröffentlichten Strategiebroschüre betont: „Deutsche Forschung an Synchrotronstrahlungsquellen ist weltweit führend. Um diese Stellung zu erhalten, empfiehlt das KFS Investitionen in die Weiterentwicklung der Quellen. Das KFS unterstützt daher die Projekte PETRA IV und BESSY III ...“<sup>1</sup> Ebenso empfiehlt das hochkarätig besetzte, internationale Gutachtergremium im Rahmen der im Jahr 2020 durchgeführten strategischen Evaluierung des Forschungsbereichs MATERIE der Helmholtz-Gemeinschaft die Ausarbeitung der Pläne für die Projekte PETRA IV, BESSY III und DALI, um so die deutsche Spitzenstellung in diesem zukunftsweisenden Forschungsfeld nicht nur zu sichern, sondern auch weiter auszubauen.

Mit dem vorliegenden Dokument wird die strategische Zukunftsplanung der beschleunigerbasierten Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft vorgestellt. Mit dieser soll sichergestellt werden, dass auch in Zukunft in Deutschland international einzigartige Experimentiermöglichkeiten mit Synchrotronstrahlungsquellen, Freie-Elektronen-Lasern sowie Anlagen für die Forschung mit hohen elektromagnetischen Feldern zur Verfügung stehen.

Diese Strategie umfasst im Bereich der Speicherringquellen eine Modernisierung der bestehenden komplementären Quellen BESSY II und PETRA III auf den neuesten Stand der Technologie, mit der sich eine um ca. zwei Größenordnungen höhere Leuchtdichte im Vergleich zu den derzeitigen Quellen erreichen lassen wird. Damit lassen sich diese einzigartigen Photonenstrahlen auf winzige Strahlflecke im Nanometerbereich fokussieren, welche die Analytik auf extrem kleinen Längenskalen erst möglich macht. Gleichzeitig ist man in der Lage, zu bisher unerreichbaren Zeitskalen bei kinetischen *in-situ*- oder *operando*-Experimenten, d.h. zu Experimenten unter realistischen Einsatz- und Prozessbedingungen, vorzudringen. Die bestehende Komplementarität in den Hauptanwendungsbereichen und damit verbunden in den angebotenen Photonenenergiebereichen zwischen BESSY II und PETRA III soll auch in Zukunft beibehalten werden. Daher wird BESSY III für den weichen Röntgenbereich (Photonenenergie: 10 eV bis ca. 2.5 keV) optimiert, mit der Spektroskopie zur Untersuchung elektronischer Eigenschaften von Materialien als Hauptanwendungsgebiet. PETRA IV wird auf den harten Röntgenbereich (2.5 keV bis >150 keV) ausgerichtet für die Bestimmung der atomaren Struktur und Dynamik der Materie. Der Schwerpunkt von DALI liegt auf der niederenergetischen THz-Strahlung (0.1 THz - 30 THz). Im Fokus steht hierbei die extrem hohe Feldstärke, die die Untersuchung nicht-linearer Effekte und die selektive Manipulation kollektiver, niederenergetischer Anregungen ermöglicht. Die beiden in ihrem Photonenenergiebereich komplementären Freie-Elektronen-Laser FLASH (für den weichen Röntgenbereich zur Spektroskopie und Analyse elektronischer Eigenschaften) und der European XFEL (im Bereich der harten Röntgenstrahlung zur Untersuchung von Struktur und Dynamik auf atomaren Dimensionen) runden dieses Portfolio an Strahlungsquellen ab. Beide FELs ermöglichen die Untersuchung von ultraschneller Dynamik, Reaktionen oder Nichtgleichgewichtszuständen mit einer Zeitauflösung im Femtosekundenbereich und erlauben so z.B. die Verfolgung chemischer Reaktionen auf atomarer Ebene in Echtzeit. Die daran anschließenden längeren Zeitskalen von Subnanosekunden bis zu quasi stationären Bedingungen werden dann durch zeitaufgelöste Experimente an Speicherringen abgedeckt.

Im Rahmen der Modernisierung der Anlagen sind zahlreiche Maßnahmen vorgesehen, um die rasant ansteigenden Datenraten und -mengen, die mit der substanziell verbesserten räumlichen und zeitlichen Auflösung der Experimente einhergehen, handhaben zu können. Neue Modelle für die Datenauswertung, beispielsweise durch den Einsatz auf künstlicher Intelligenz basierender Algorithmen, werden es ermöglichen, mittels zentral verfügbarer Analysewerkzeuge die in Datenbanken an den Forschungsinfrastrukturen liegenden Messdaten von extern auszuwerten. Die Digitalisierung und weitgehende Automatisierung der neuen Anlagen werden in Verbindung mit den neuen Möglichkeiten der Kommunikationstechnologie eine Revolution des Nutzerbetriebes herbeiführen. Hieraus resultiert nicht nur eine deutlich größere „Resilienz“ des Zugangs zu den Anlagen und deren Betrieb im Angesicht globaler Pandemien durch die Möglichkeit von „Remote Access“- und „Mail-in“-Experimenten, sondern es wird darüber hinaus auch durch eine Reduktion der Reisetätigkeit zum Klimaschutz im Einklang mit dem Europäischen „Green Deal“ beigetragen.

Ziel aller dieser Maßnahmen ist sicherzustellen, dass die deutschen, beschleunigerbasierten Photonenquellen auch in den nächsten Dekaden im Vergleich zu den Einrichtungen in den USA und Asien international eine Spitzenstellung einnehmen werden.

---

<sup>1</sup><https://www.sni-portal.de/de/Dateien/kfs-broschuere>

## 2 Relevanz der Photonenquellen für den Forschungs- und Wirtschaftsstandort Deutschland

Beschleunigerbasierte Photonenquellen besetzen ein breites Anwendungsfeld in Wissenschaft und Technik und liefern essenzielle Beiträge zu den großen gesellschaftlichen Herausforderungen in Feldern wie Gesundheit, Energie, Erde und Umwelt, Verkehr und Informationstechnologie (Abb. 2.1). Dabei wird der gesamte Bereich von der Grundlagenforschung bis zur industriellen Anwendung abgedeckt. Die beschleunigerbasierten Anlagen der Helmholtz-Gemeinschaft stellen eine einzigartige analytische Infrastruktur für eine sich stetig erweiternde Palette von Wissenschaftsgebieten dar. Eine große Zahl Forschender aus Universitäten, außeruniversitären Forschungseinrichtungen und der Industrie nutzen diese Quellen für ihre Untersuchungen. Verschiedene Forschungsorganisationen wie die Max-Planck-Gesellschaft (MPG), verschiedene Leibniz-Institute, das Europäische Molekularbiologie-Labor (EMBL) und die Physikalisch-Technische Bundesanstalt (PTB) betreiben eigene Strahlführungen, Experimente und Labore an den Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft. Das weltweit einmalige Förderinstrument des BMBF, die Verbundforschung, ermöglicht deutschen Universitätsgruppen, die Anlagen direkt und unmittelbar zu nutzen und durch den Aufbau spezialisierter, auf die eigenen Anforderungen angepasster Experimente zum Methodenportfolio der Quellen beizutragen.

Die Forschung an beschleunigerbasierten Anlagen in Deutschland hat eine langjährige Tradition, die bereits 1964 mit den ersten Experimenten am DESY-Synchrotron in Hamburg ihren Anfang nahm. An den nationalen Synchrotronstrahlungsquellen (früher DORIS II/III und BESSY, derzeit PETRA III, BESSY II, FLASH und European XFEL) wurden viele bahnbrechende, das gesamte Wissenschaftsfeld beeinflussende Methoden entwickelt und wichtige wissenschaftliche Entdeckungen gemacht. Diese Tradition setzte sich mit der steigenden Internationalisierung dieses Wissenschaftsfeldes auch an den europäischen und internationalen Quellen fort. Im Folgenden soll kurz auf eine Auswahl der wichtigsten Erfolge und Auszeichnungen eingegangen werden, die an Quellen in Deutschland erzielt wurden.

### 2.1 Preisgekrönte Forschungsleistungen

Weiche Röntgenstrahlung ist in einzigartiger Weise für die Untersuchung magnetischer Materialien geeignet, z.B. der magnetischen Kopplung in künstlichen Schichtstrukturen. Experimente an solchen Strukturen an BESSY II haben dazu beigetragen, den Effekt des Riesenmagnetowiderstands (GMR) besser zu verstehen, für dessen Entdeckung Peter Grünberg (Forschungszentrum Jülich, FZJ) und Albert Fert (U. Paris-Saclay, Frankreich) im Jahr 2007 mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet wurden. Der GMR-Effekt ist die Basis für alle Leseköpfe moderner Festplattenspeicher und hat in nur 10 Jahren den Sprung von der Entdeckung und Patentierung hin zur industriellen Massenproduktion geschafft. Er ist damit ein Paradebeispiel für die schnelle Umsetzung von Grundlagenforschung in die Anwendung und in einen Milliarden-Euro-Markt.

Der Übergang zu einem CO<sub>2</sub>-neutralen Energiesystem erfordert die Erzeugung von grünem Wasserstoff und dessen Umwandlung in synthetische Kraftstoffe und Grundchemikalien im industriell-globalen Maßstab. Das Verständnis chemischer Konversionsprozesse mit Hilfe katalytischer Materialien stellt die Basis für die notwendigen Innovationssprünge in der chemischen Synthese dar. *Operando*-Spektroskopie- und Mikroskopie-Methoden mit weicher und

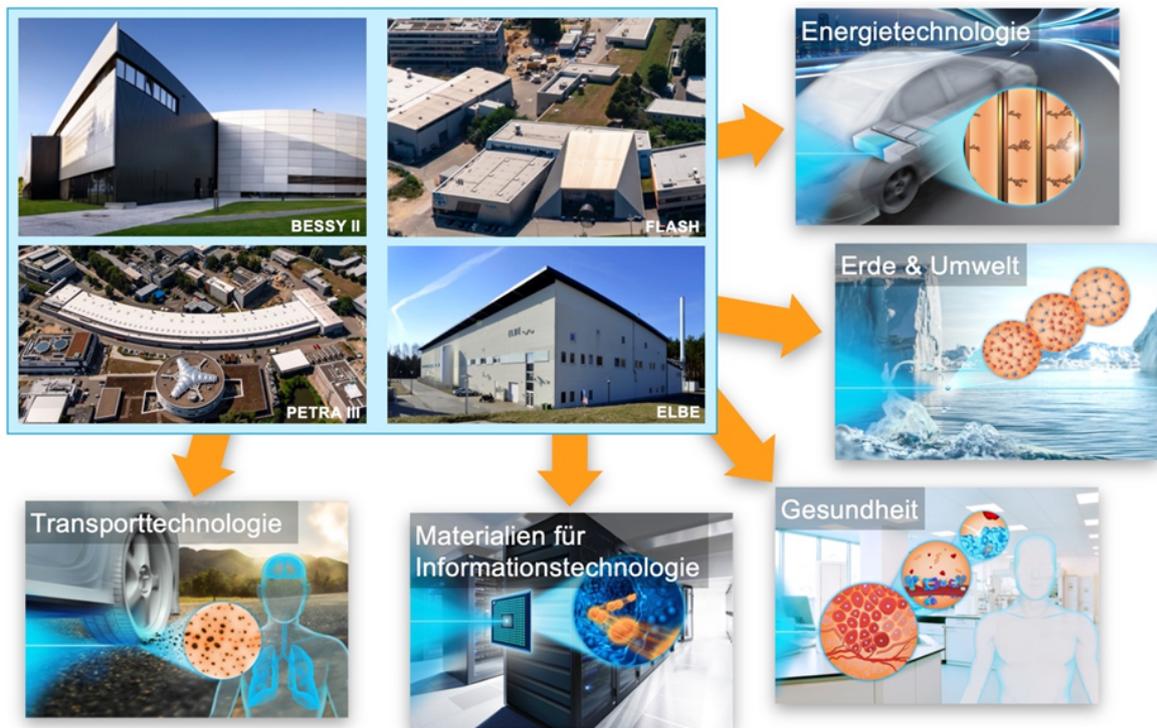


Abbildung 2.1: Wissenschaftsgebiete, für die beschleunigerbasierte Photonenquellen wichtige Beiträge leisten.

mittlerer Synchrotronstrahlung liefern entscheidende Einblicke in die Funktionsweise eines aktiven Katalysators. Für seine Arbeiten zur Charakterisierung von heterogenen Katalysatoren, zu denen Untersuchungen an BESSY II wesentlich beigetragen haben, und deren Aufbereitung für industrielle Anwendungen erhielt Robert Schlögl (Fritz-Haber-Institut der MPG, FHI) zahlreiche Preise, u.a. den Alwin-Mittasch-Preis der Gesellschaft für Chemische Technik und Biotechnologie e.V. (DECHEMA) im Jahr 2015. Für seine Untersuchungen der chemischen Prozesse an Oberflächen erhielt Gerhard Ertl, ebenfalls FHI, 2007 den Nobelpreis für Chemie.

Schon in den 1960er Jahren wurde das Potenzial der Synchrotronstrahlung für die Untersuchungen biologischer Proben mittels Kleinwinkelstreuung und kristallographischer Methoden erkannt. Als einer der Pioniere am DESY zählt hierfür die Gruppe um Kenneth C. Holmes (Max-Planck-Institut für Medizinische Forschung, Heidelberg), der für seine Arbeiten auf diesem Gebiet mit einer Reihe von Preisen ausgezeichnet wurde (1998: „Garbor Medal“ der Royal Society, London; 2000: „Europäischer Latsis-Preis“; 2001: „Gregori-Aminoff-Preis“ der Königlich Schwedischen Akademie der Wissenschaften). Diese bahnbrechenden Arbeiten trugen wesentlich zu unserem heutigen molekularen Verständnis der Struktur und Funktion von Muskeln bei.

Die Erfolge bei der Lösung der Kristallstrukturen makromolekularer Verbindungen am Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) und DESY (und an den von EMBL, MPG und DESY betriebenen Strahlführungen) sind vielfältig. Als besonderes Beispiel sollen hier die bei DESY gemessenen Beiträge zur Lösung der Struktur des Ribosoms (Abb. 2.2), das sind die „Eiweißfabriken“ in unseren Zellen, durch die Arbeitsgruppe von Ada Yonath (MPI Außenstation am DESY, Hamburg, Weizmann Institute of Science, Israel) herausgestellt werden. Für diese epochale Leistung wurde Ada Yonath mit einer Reihe von Preisen geehrt, deren wichtigster der Nobelpreis für Chemie im Jahr 2009 war, der ihr zusammen mit Venkatraman Ramakrishna und Thomas E. Steitz verliehen wurde. Basierend auf diesen Forschungsarbeiten hat sich in den letzten Jahren ein neuer Weg für die gezielte Suche nach neuartigen Antibiotika eröffnet.

Die Bedeutung der Synchrotronstrahlung für die Strukturblogie drückt sich auch dadurch aus, dass auf dem

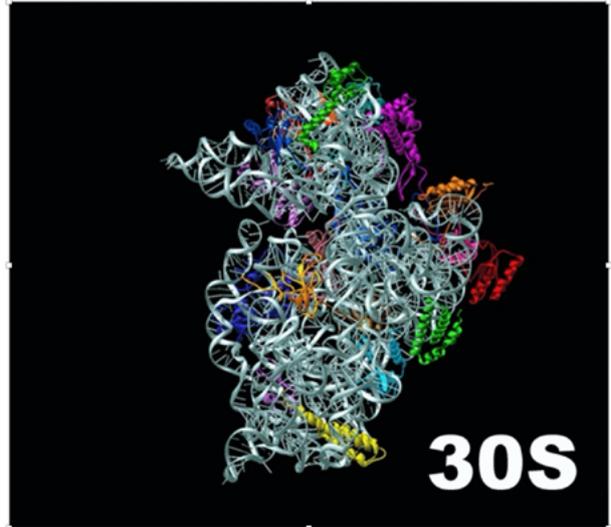


Abbildung 2.2: Links: Ada Yonath beim Experimentieren an einer Synchrotronstrahlungsquelle. Rechts: Schematische Struktur der 30S-Untereinheit des Ribosoms.

DESY-Gelände in unmittelbarer Nachbarschaft von PETRA III das Center for Structural Systems Biology (CSSB) errichtet wurde, in dem 10 Partnerinstitutionen an strukturellen und systemischen Fragen in Bezug auf Infektionsprozesse forschen.

An der High-Field High-Repetition-Rate Terahertz Facility ELBE (TELBE) des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf (HZDR) konnte ein internationales Team erstmals in magnetischen Materialien die Nutation, d.h. die Schwingungsbewegung der Drehachse während der Präzession von Elektronenspins beobachten (Abb. 2.3). Dieses Ergebnis ist von fundamentaler Bedeutung für die ultraschnelle Datenspeicherung. Die Vervielfachung der Photonenenergie infolge einer nichtlinearen Wechselwirkung zwischen Licht und Materie ist eine Schlüsseltechnologie in der modernen Elektronik und Optoelektronik, da sie die Konversion optischer oder elektronischer Signale in Signale

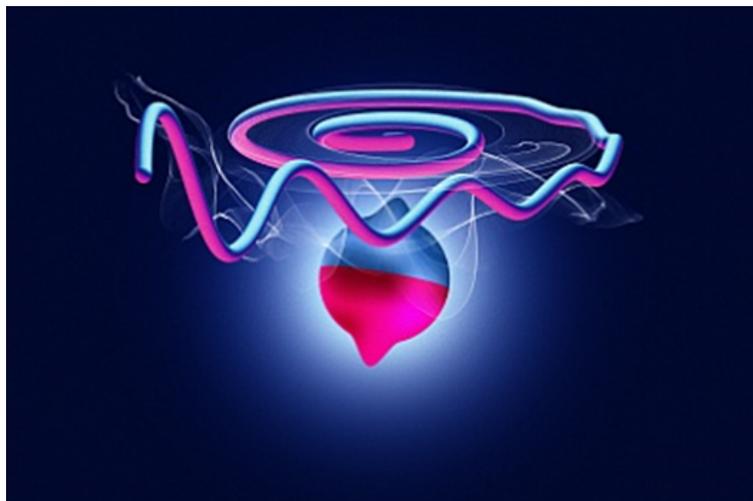


Abbildung 2.3: Schematische Repräsentation der Nutation des Elektronenspins in einem magnetischen Material. (Illustration Foto: Dunia Maccagni)

deutlich höherer Frequenzen und damit um mehrere Größenordnungen höhere Taktraten bei der Informationsübermittlung ermöglicht.

Im technologisch besonders interessanten THz-Bereich wurde vielfach vorhergesagt, dass diese in Graphen besonders effizient sei. In dem renommierten Fachjournal NATURE berichtet das Team um Prof. Turchinovic (Universität Bielefeld) nun von der erstmaligen erfolgreichen Frequenzvervielfachung um das bis zu Siebenfache unter technologisch relevanten Bedingungen, die ihnen an der THz-Lichtquelle an ELBE gelang (Abb. 2.4).

## 2.2 Beiträge zum Innovationsgeschehen

Die Erfolge der Experimente an beschleunigerbasierten Anlagen zeigen sich nicht nur in Auszeichnungen und Preisen, sondern auch in einer weiter steigenden Nachfrage und Ausweitung der wissenschaftlichen und technischen Anwendungsfelder, sowohl in Deutschland, Europa als auch darüber hinaus, sowie in steigenden Publikationszahlen in Fachzeitschriften. Insgesamt haben Experimente an diesen Anlagen bisher weltweit zu insgesamt neun Nobelpreisen beigetragen.

Über ihre wissenschaftliche Bedeutung hinaus schaffen die beschleunigerbasierten Anlagen der Helmholtz-Gemeinschaft wesentliche Forschungs- und Entwicklungsmöglichkeiten für die Industrie und stärken dadurch auch die Innovationskraft Deutschlands. So markierte zum Beispiel die Ankündigung der großen Halbleiterproduzenten Samsung und TSMC im Herbst 2018, EUV-Lithografie (EUVL, Abb. 2.5) für die Herstellung ihrer High-End-Prozessoren einzusetzen, den kommerziellen Durchbruch dieser Technologie. Inzwischen sind mit EUVL hergestellte Prozessoren fester Bestandteil moderner Anwendungselektronik. Die Technologie basiert wesentlich auf der metrologischen Charakterisierung von Projektionsoptiken der Carl Zeiss SMT GmbH durch die PTB an BESSY II und an der MLS der PTB.

Im Transportwesen spielen hochfeste Stähle für den Leichtbau (Abb. 2.6) eine entscheidende Rolle zur Verringerung des Energiebedarfs und des CO<sub>2</sub>-Ausstoßes. Das Bearbeiten und Schneiden speziell dieser hochfesten Stähle erzeugt zusätzliche mechanische Spannungen, welche die Lebensdauer unter dynamischer Belastung negativ beeinflussen. Durch die mikroskopische Vermessung und Quantifizierung dieser durch Bearbeiten und Schneiden entstehenden Spannung mit harter Röntgenstrahlung bei PETRA III durch ein schwedisches Konsortium von Forschungsinstitutionen und Firmen (SSAB, SWERIM, VINNOVA) konnte ein besseres Verständnis dieser Prozesse erreicht werden.

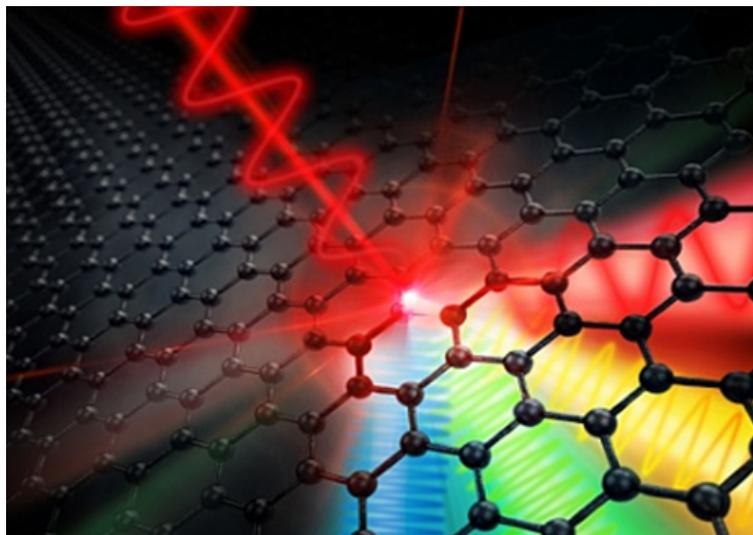


Abbildung 2.4: Graphen ermöglicht Datenübertragung mit Taktraten im Terahertz-Bereich (Illustration Foto: Juniks/HZDR)

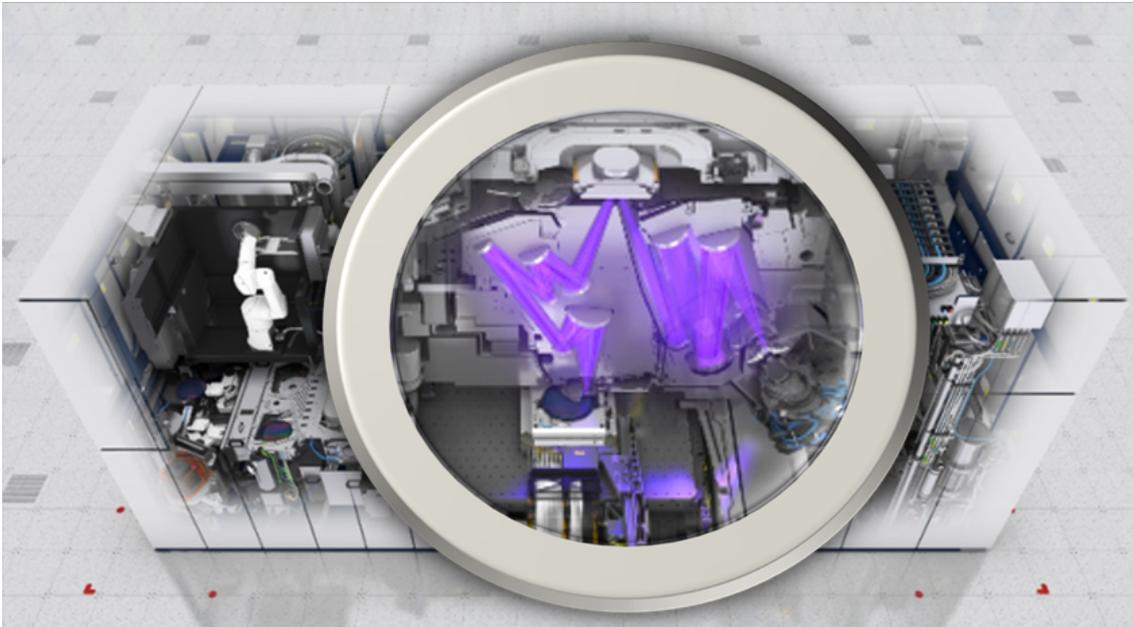


Abbildung 2.5: EUVL-Belichter mit Projektionsoptiken (farbig); Messungen der PTB an BESSY II und der MLS haben wesentlich zur Entwicklung dieser Optiken beigetragen (Abbildung: ASML).

Damit kann ein vermehrter Einsatz dieser Materialien im Automobilbau ins Auge gefasst werden (Abb. 2.6).

Neben der direkten Nutzung der beschleunigerbasierten Photonenquellen durch die Industrie im Rahmen von vergüteten Industriemesszeiten gibt es eine signifikante indirekte Nutzung in Zusammenarbeit mit akademischen Gruppen über begutachtete Messzeitanträge. Diese beläuft sich auf ca. 10 % der Experimentierzeiten.



Abbildung 2.6: Einsatz hochfester Stähle im Automobilbau zur weiteren Gewichtsreduzierung.

## 2.3 Weiterentwicklung der Experimentiertechniken

Generell hängt der Erfolg wissenschaftlicher Experimente an den Anlagen entscheidend von oft höchst komplexen Instrumentierungen ab, die in der Regel an den Quellen selbst oder in Kooperation mit Industriepartnern entwickelt werden. So ist die Qualität der Strahlung unmittelbar abhängig von der Präzision der zur Strahlführung und Fokussierung eingesetzten, röntgenoptischen Elemente. Die genaue Vermessung dieser Elemente stellt eine wichtige Voraussetzung dar, um hochgenaue optische Flächen noch präziser herstellen zu können. Dazu werden am HZB die Messverfahren in Kooperation mit Industriepartnern stetig verbessert; diese Verfahren stehen dann wissenschaftlichen Kooperationspartnern, aber auch kommerziellen Herstellern von optischen Elementen wie der Carl Zeiss AG zur Verfügung. Für die Entwicklung der Nanometer-Optikkomponenten-Messmaschine (NOM) erhielt ein Team um Heiner Lammert (HZB) den „Innovationspreis Synchrotronstrahlung“ im Jahr 2009.

Um das gesamte Potenzial immer leistungsfähigerer Photonenquellen vollumfänglich nutzen zu können, muss kontinuierlich in neue Entwicklungen in Strahlführungskomponenten, Experimentierstationen, Detektoren, Datenerfassung und Auswertalgorithmen investiert werden. Für die Entwicklung von Höchstleistungspixeldetektoren für Röntgenstrahlung, die kurzfristig mit einer Bildwiederholrate von 5 MHz am European XFEL betrieben werden können, wurde Heinz Graafsma (DESY) zusammen mit Kollegen vom Paul-Scherrer-Institut (PSI), Schweiz, im Jahr 2019 ebenfalls mit dem „Innovationspreis Synchrotronstrahlung“ ausgezeichnet. Die entwickelte Technologie wird in den nächsten Jahren auch für leistungsfähigere Detektoren an Synchrotronstrahlungsquellen genutzt werden.

Für zeitaufgelöste Experimente, in denen der Ablauf eines Prozesses direkt beobachtet wird, stellen die unvermeidlichen Fluktuationen (Jitter) der Ankunftszeit der Pulse den limitierenden Faktor dar. An ELBE gelang es durch ein ausgefeiltes System, mit dem die Ankunftszeit der Pulse genau gemessen wird, diesen „Jitter“ zu kompensieren. Das führt zu einer Zeitauflösung von wenigen Femtosekunden, was eine extrem genaue Bestimmung der Phase des elektrischen THz-Feldes, und damit auch die Erforschung von kohärenten Prozessen auf dieser Zeitskala ermöglicht.

### 3 Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft

Die Nutzung von Synchrotronstrahlung hat in Deutschland eine lange, international anerkannte Tradition. Diese baut auf dem einzigartigen Portfolio komplementärer nationaler Quellen auf (PETRA III, BESSY II, ELBE und FLASH sowie der Helmholtz-Beitrag zum Betrieb des Beschleunigers des European XFEL), die die Helmholtz-Gemeinschaft für die Nutzergemeinschaft betreibt und die im internationalen Vergleich eine Spitzenstellung einnehmen. Dies spiegelt sich auch in den weltweit einzigartigen Infrastrukturen der Helmholtz-Gemeinschaft zur Entwicklung neuartiger Beschleunigertechnologien wider (z.B. im Rahmen des ATHENA-Projekts und der Beschleunigerentwicklungsplattform KARA). Denn die kontinuierliche Weiterentwicklung der Nutzereinrichtungen ist für die Wettbewerbsfähigkeit und Zukunftsfähigkeit dieser Anlagen für die deutsche wie auch allgemein für die europäische Wissenschaftsgemeinschaft und darüber hinaus von überragender Bedeutung.

Die Relevanz der beschleunigerbasierten Lichtquellen für die deutsche und internationale Forschungslandschaft bestätigt sich quantitativ durch die Zahlen in der folgenden Tabelle 3.1, die für den Zeitraum 2016 bis 2019 repräsentativ sind. Mehr als 9100 Nutzerbesuche pro Jahr, darunter 7600 Besuche von externen Nutzerinnen und Nutzern, geben einen Einblick in die Bedeutung dieser Anlagen für die Forschung. Etwa 30 % bis 40 % der Nutzerinnen und Nutzer kommen aus ausländischen Forschungseinrichtungen. Aus den Experimenten an den vier Lichtquellen gehen jährlich mehr als 1000 begutachtete Publikationen in renommierten internationalen Fachzeitschriften hervor. Der Zugang zu diesen Einrichtungen wird über ein transparentes, ausschließlich auf wissenschaftlicher Exzellenz basierendes Peer-Review-Verfahren nach Helmholtz-Standards und auf Grundlage der „Europäischen Charta für den Zugang zu Forschungsinfrastrukturen“ gewährt. Die verfügbare Strahlzeit an den Experimentierstationen der Helmholtz-Nutzereinrichtungen ist im Durchschnitt um den Faktor 2 überbucht, an einzelnen Instrumenten aber auch deutlich höher. D.h. weniger als 50 % der eingereichten Nuttermesszeitanträge können Strahlzeit erhalten. Diese über Jahre hinweg konstante, hohe Überbuchung zeigt eindrucksvoll den Bedarf und somit die Relevanz dieser Einrichtungen.

Einrichtung	Publikationen pro Jahr*	Anzahl der Nutzerbesuche pro Jahr	davon externe Nutzerbesuche**	davon ausländische Nutzerbesuche
PETRA III***	521	6300	5050	2150
BESSY II	510	3560	3125	1145
ELBE	36	105	77	32
FLASH	26	490	310	120

Tabelle 3.1: \*) Artikel in ISI/SCOPUS zitierten Zeitschriften; \*\*) Einschließlich der Nutzerinnen und Nutzer anderer Helmholtz-Zentren; \*\*\*) Diese Werte beziehen sich auf das Jahr 2019, da die Anzahl der Nutzerbesuche an PETRA III über die letzten Jahre stetig ansteigt.

Die wissenschaftlichen Experimente an diesen Nutzeranlagen dienen insbesondere der Untersuchung der atomaren Struktur und der elektronischen, magnetischen und chemischen Eigenschaften von Materie und Materialien sowie entsprechender elektronischer, katalytischer und (bio-)chemischer Prozesse auf allen relevanten Längen- und Zeitskalen. Um die wissenschaftliche Breite der Nutzung dieser Anlagen zu quantifizieren, wurden die Publikationen den sechs Helmholtz-Forschungsbereichen thematisch zugeordnet (Abb. 3.1), ergänzt durch den Bereich

der Kulturgutforschung, da diese Studien immer wieder eine große Beachtung in der allgemeinen Öffentlichkeit finden.

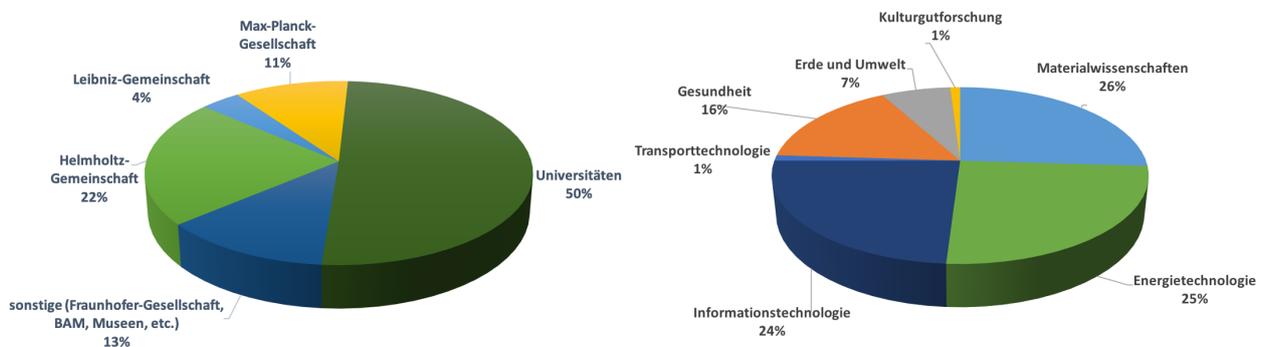


Abbildung 3.1: Verteilung der Nutzung der Helmholtz-Einrichtungen nach Forschungsorganisationen (links) und Zuordnung der Publikationen zu den Forschungsfeldern (rechts). Trotz des niedrigen Anteils der Publikationen im Feld Kulturgutforschung werden diese hier explizit aufgeführt, da sie eine große Beachtung in der allgemeinen Öffentlichkeit finden.

## 4 Herausforderungen in der Forschung mit Photonen im 21. Jahrhundert

Wie im vorangegangenen Kapitel bereits beschrieben, erstrecken sich die Anwendungen von Experimenten an beschleunigerbasierten Strahlungsquellen über eine große Anzahl von Wissenschaftsfeldern, die zum Teil vollständig vom Vorhandensein derartiger Quellen abhängig sind. Auch hat die deutsche Nutzergemeinschaft in der Vergangenheit sehr deutlich gezeigt, wie erfolgreich Synchrotron- und FEL-Strahlung zur Lösung wissenschaftlicher und drängender gesellschaftlicher Fragen eingesetzt werden kann. Fortschritte zur Lösung vieler gesellschaftlich relevanter Herausforderungen in Bereichen wie Lebenswissenschaften, Umwelt und Nachhaltigkeit, Energie, Mobilität, Informationstechnologie und Materialforschung hängen von der Verfügbarkeit der analytischen Methoden moderner beschleunigerbasierter Strahlungsquellen ab. Der sich ergebende Bedarf an einer Weiterentwicklung der nationalen Quellen aus Sicht der Nutzerinnen und Nutzer, um das analytische Potenzial in Deutschland auf die Herausforderungen der Zukunft vorzubereiten, ist in einer 2020 erschienenen Strategiebroschüre des Komitees Forschung mit Synchrotronstrahlung (KFS) – das von der Nutzergemeinschaft gewählte Gremium zur Vertretung der Nutzerinteressen gegenüber den Quellenbetreibern und den Zuwendungsgebern – wie folgt zusammengefasst worden: „... Deutsche Forschung an Synchrotronstrahlungsquellen ist weltweit führend. Um diese Stellung zu erhalten, empfiehlt das KFS Investitionen in die Weiterentwicklung der Quellen. Das KFS unterstützt daher die Projekte PETRA IV und BESSY III ...“<sup>1</sup> Ebenso lautet eine Empfehlung des Gutachtergremiums der Strategischen Evaluierung des Forschungsbereichs MATERIE der Helmholtz-Gemeinschaft im Jahr 2020: „... als Teil einer priorisierten Planung einen TDR für PETRA IV und einen CDR für BESSY III zu entwickeln ...“ sowie „... das Engagement für die THz-Methodik und -Wissenschaft noch mehr zu verstärken, um in der laufenden THz-Revolution weltweit führend zu werden. ...“ und dazu „einen CDR (gefolgt von einem TDR) für DALI als Vorhaben des ELBE-Ausbaus vorzulegen.“

Im Folgenden wird auf einige der Herausforderungen an analytische Methoden, wie diese von den hier vorgestellten Quellen zur Verfügung gestellt werden, für ausgewählte, gesellschaftlich relevante Forschungsfelder eingegangen.

### 4.1 Gesellschaftlich relevante Forschungsfelder

#### 4.1.1 Materialforschung

Die Materialforschung nimmt eine Querschnittsfunktion über viele Bereiche wie zum Beispiel Energietechnik, Mobilität und Informationstechnologien ein. Sie stellt eine Schlüsseldisziplin mit stark interdisziplinärem Charakter dar, die ein breites Spektrum an Lösungen zur Bewältigung zukünftiger technischer Herausforderungen bietet. Diese erfordern in vielen Fällen die Entwicklung neuartiger, teilweise multifunktionaler Materialien, deren Eigenschaften oftmals durch ein gezieltes Design auf Längenskalen bis in den Nanometerbereich für die entsprechenden Anwendungen maßgeschneidert werden. Dieses rationale Design von neuen, innovativen Werkstoffen, die nach wissenschaftlichen Prinzipien mit maßgeschneiderten Strukturmerkmalen von der Atom- und Nanoskala bis hin zu meso- und makroskopischen Dimensionen realisiert werden müssen, erfordert zur Analyse und Überprüfung der Strukturparameter und Funktion analytische Werkzeuge, die in der Lage sind, die atomare und elektronische Struktur und Dynamik der Materie auf den relevanten Längen- und Zeitskalen – oft auch unter für die Anwendung

<sup>1</sup><https://www.sni-portal.de/de/Dateien/kfs-broschueure>

relevanter *in-situ*- oder *operando*-Bedingungen – zu untersuchen. Bedingt durch die im Vergleich noch relativ großen Quellpunkte bestehender Synchrotronstrahlungsquellen, stehen für Experimente mit auf die Nanometerlängenskala fokussierten Strahlen nur sehr geringe Intensitäten zur Verfügung. Eine Lösung kann hier nur durch eine neue Generation von Photonenquellen erreicht werden, die bisher nicht verfügbare analytische Fähigkeiten zur Untersuchung sehr kleiner oder auf der Nano-Skala inhomogener Proben mittels bildgebender Verfahren möglich machen werden. Mit den nanofokussierten, harten Röntgenstrahlen von PETRA IV wird man die atomare Struktur derartiger Werkstoffe auch unter einsatznahen Prozessbedingungen abbilden und untersuchen können, während die weichen Röntgenstrahlen von BESSY III orts aufgelöste Information über die elektronischen Eigenschaften liefern wird.

#### 4.1.2 Lebenswissenschaften

In den Lebenswissenschaften ist eine der großen Herausforderungen der Zukunft die Abbildung über viele Längenskalen, um ein besseres Verständnis über komplexe Vorgänge in lebenden Organismen zu erlangen (Abb. 4.1). Das Ziel ist dabei zu verstehen, wie die Bestandteile eines Organismus miteinander interagieren, um Funktionen höherer Ordnung zu erzeugen. Entscheidend für die Erreichung dieses Ziels ist die hierarchische Abbildung derselben Probe auf vielen räumlichen Skalen, von der molekularen und zellulären Ebene bis zu den Organen bzw. dem gesamten Organismus, um die Funktion auf einer Ebene mit Funktionen auf höheren Ebenen zu verbinden. Dies ist nur unter Einsatz und Zusammenwirken verschiedenster Methoden möglich. Die höchste Auflösung bis in den atomaren Bereich wird durch kristallographische Methoden unter Einsatz von harter Synchrotron- oder FEL-Strahlung erreicht. Daran schließt sich die Kryo-Elektronenmikroskopie an, die mittlerweile in günstigen Fällen in den Auflösungsbereich unter 1 nm vordringen kann. Diese hat jedoch den Nachteil, dass nur sehr dünne Probenschnitte untersucht werden können. Mittels höchst aufgelöster Röntgenbildgebung unter Ausnutzung des Phasenkontrastes und mittels tomographischer Methoden, die sich im Auflösungsbereich an den der Elektronenmikroskope anschließen, wird man in der Lage sein, selbst größere Objekte mit hoher Auflösung in drei Dimensionen abzubilden. Harte Röntgenstrahlen (PETRA IV) eignen sich gut zur Abbildung ganzer Organe und Organismen in 3D im Mikrometer- bis Millimeterbereich. Weiche Röntgenstrahlen (BESSY III) bieten eine bewährte Methode, um intakte Zellen und Gewebe in 3D im Nanometerbereich abzubilden. Für transparente Objekte schließt sich dann noch die optische Lasermikroskopie im etwas niedrigeren Auflösungsbereich an. Ein weiterer Informationsgewinn kann durch die Korrelation der Kontrastmechanismen der verschiedenen Abbildungsverfahren erreicht werden. Diese hierarchische Bildgebung ist nicht nur für das fundamentale Verständnis komplexer biologischer Strukturen und Prozesse notwendig, sondern auch für die medizinische Diagnostik, wie dies zum Beispiel an Proben von mit SARS-CoV-2 infiziertem Lungengewebe verstorbener Patienten demonstriert wurde.

Zurzeit sind Experimente zur höchst aufgelösten Röntgenbildgebung durch den kohärenten Fluss der zur Verfügung stehenden Quellen limitiert. Hier werden die geplanten Modernisierungen eine Verbesserung um bis zu einem Faktor 1000 erzielen.

Dies erlaubt bei gleicher Experimentierzeit eine um einen Faktor von ca. 10 bessere Auflösung oder bei gleicher Auflösung eine 1000-mal schnellere Messung, was die Erforschung von dynamischen Prozessen auf bisher unerreichbaren Zeitskalen ermöglichen wird. Die oben erwähnten röntgenkristallographischen Methoden werden auch weiterhin eine eminent wichtige Rolle bei der Aufklärung der atomaren Struktur und Funktion biologischer Makromoleküle spielen. Wegen ihres hohen Probandendurchsatzes eignen sich diese Methoden auch zur systematischen Suche von Wirkstoffen, um die Funktion bestimmter Zielproteine eines Organismus zu beeinflussen. Dies wurde durch die weltweit angelegte Suche nach Wirkstoffen zur Bekämpfung der COVID-19-Pandemie eindrucksvoll demonstriert. Die Hydrathülle von Biomolekülen enthält geordnete Strukturen von Wassermolekülen, die für deren Funktion essenziell sind. Die hohe Intensität und Wiederholrate der THz-Strahlung von DALI wird bahnbrechende neue Experimente ermöglichen, die fundamentale Fragen zur Rolle der Struktur und Dynamik der Hydrathülle adressieren. Ultimativ werden diese Experimente sogar in lebenden Zellen möglich sein. Darüber hinaus werden es THz-Pulse ermöglichen, primäre Reaktionen in spannungsgesteuerten Membranproteinen und Ionentransport durch Membranen studieren zu können. Experimente dieser Art, gerade in der Kombination von Feldstärke mit

hoher Repetitionsrate, werden erst durch eine Anlage wie DALI möglich werden.

### 4.1.3 Erde und Umwelt

Eine der wichtigsten, immer noch offenen wissenschaftlichen Fragestellungen im Bereich Erde und Umwelt ist die nach dem Zusammenhang zwischen der atomaren Struktur und Dynamik und den makroskopisch beobachteten Eigenschaften von Wasser. Hier wird erwartet, dass mit den verbesserten Strahleigenschaften neuer Quellen signifikanter Fortschritt erreicht wird. Dabei kommt es hauptsächlich auf die verbesserten Kohärenzeigenschaften der Strahlung an, die sowohl zur Untersuchung der Struktur aber auch der Dynamik einen vollkommen neuen Parameterraum erschließen werden. Zu dem hochinteressanten Thema Wasser ist ein „Center for Molecular Water Science“ (CMWS) am DESY mit Beteiligung und Kollaborationen von mehr als 40 wissenschaftlichen Gruppen aus ganz Europa geplant (Stand Jan. 2021). Wasser spielt auch eine extrem wichtige Rolle für das Verhalten der Gesteine im Erdmantel und für den Vulkanismus. Um dies im Labor zu studieren, müssen Hochdruckexperimente an extrem kleinen Proben in sogenannten Stempeldruckzellen durchgeführt werden, die sich nur mit einem sehr kleinen, gut kollimierten, hochenergetischen Röntgenstrahl untersuchen lassen, speziell dann, wenn man bei sehr hohen Drücken in der Größenordnung von 100 GPa (1 Mbar) und mehr arbeiten muss, wie man diese beispielsweise im Erdinnern vorfindet.

Das Thema Wasser ist auch eng mit Korrosionsvorgängen verbunden, die jährlich einen immensen wirtschaftlichen Schaden verursachen. Korrosionsprozesse finden an Oberflächen statt, und man benötigt für das Studium lokal auftretender Korrosionsprodukte und -prozesse fein fokussierte Strahlen und entsprechend der zu untersuchenden, chemischen Elemente Untersuchungsmethoden bei verschiedenen Photonenergien (BESSY III: Spektroskopie im weichen Röntgenbereich; PETRA IV: Diffraktion und Streuung mit harter Röntgenstrahlung). Auch THz-Strahlung spielt bei der Untersuchung von Wasser eine große Rolle. So ermöglicht sie beispielsweise das Studium der Dynamik der unterkühlten Phase von Wasser. Die Beantwortung solch spannender Fragen wie die nach der Inhomogenität des Netzes der Wasserstoffbrücken, der Anharmonizität intermolekularer Kräfte in Wasser oder nach Wegen und Raten des thermischen Energietransports lassen sich nur mittels nichtlinearer THz-Spektroskopie beantworten. DALI wird die erforderlichen hohen elektrischen Feldstärken bereitstellen können.

Ein weiteres Feld im Bereich Umwelt ist die Analyse von Spurenelementen bzw. deren präzise räumliche Verteilung sowie deren Oxidationszustand in Pflanzen, Böden oder auch Lebewesen. Die räumliche Auflösung ist wiederum durch die Fokusgröße der Röntgenstrahlung bestimmt und die zu nutzende Photonenergie (weiche oder harte Röntgenstrahlung), durch die Elemente, die untersucht werden müssen. Eine gezielte Manipulation der Hydrathülle der Pflanzenzellen durch THz-Strahlung wie an DALI ermöglicht wiederum die Untersuchung der molekularen Prozesse, die für die Aufnahme von Radionukliden oder Schwermetallen in die Pflanzenzelle und deren Transport

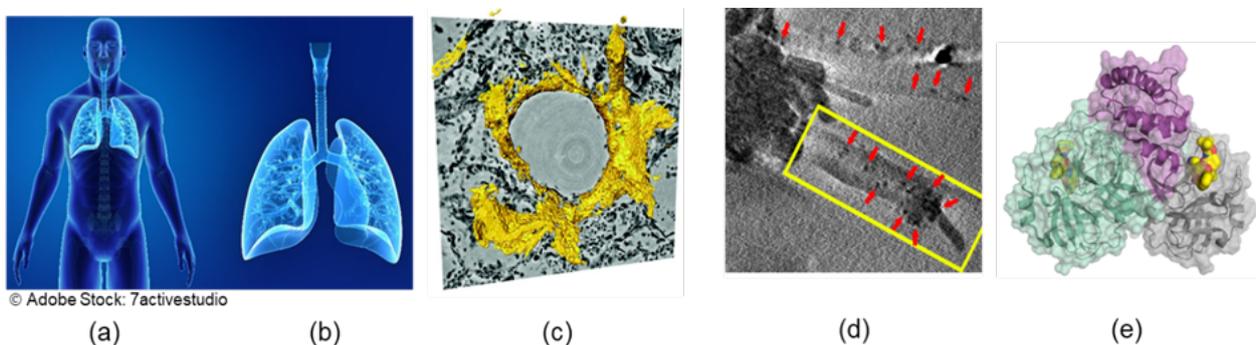


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der hierarchischen Abbildung in den Lebenswissenschaften: (a) Organismus; (b) Organ (z.B. Lunge); (c) Funktionelle Einheit des Organs (z.B. durch Covid-19-Infektion verändertes Lungenbläschen); (d) Einzelne Zelle (z.B. Coronavirus-infizierte Zelle); (e) Schlüsselprotein (z.B. Coronavirus-Protease).

in der Pflanze verantwortlich sind. Die hieraus gewonnenen Elementverteilungen und Prozessverständnisse haben fundamentale Bedeutung für die Vermeidung der Einbringung von Radionukliden oder Schwermetallen in die Nahrungskette.

#### 4.1.4 Energietechnologien

Mit den experimentellen Möglichkeiten der neuen Quellen wird man im Bereich der Energietechnologien in der Lage sein, Materialien und Prozesse für die Erzeugung, Speicherung und Konversion von Energie durch höchstauflöste *in-situ*- und *operando*-Analysen zu optimieren. Grund hierfür ist der zunehmende Einsatz von hierarchisch strukturierten Systemen, bei denen die elektrochemisch aktiven Materialien nanoskalig sind. Für die effektive Charakterisierung der 3D-Morphologie dieser Materialien und Prozesse – vor allem unter realistischen Einsatzbedingungen – fehlen derzeit weltweit die Möglichkeiten. Mittlere und harte Röntgenstrahlung ist für derartige Analysen zum einen notwendig, um in komplexe Probenumgebungen oder sogar in fertige Bauteile eindringen zu können und zum anderen – wie oben bereits beschrieben – um elementsensitive Analysen vornehmen zu können. Der an einer Quelle wie PETRA IV oder BESSY III mögliche, sehr klein fokussierte und intensive Strahl wird für lateral höchstauflöste Analysen benötigt. Die hohe Intensität ermöglicht *in-situ*- und *operando*-Studien, bei denen oft die Kinetik einer Änderung im System vorgegeben ist und die Messgeschwindigkeit des Experiments daran angepasst werden muss. Ungefähr 90 % aller relevanten Prozesse in der chemischen und der Energieindustrie beruhen auf heterogenen katalytischen Prozessen, die chemische Reaktionen von an der Oberfläche eines festen Substrats adsorbierten Molekülen ermöglichen. Die durch thermische Anregungen des Katalysatorsubstratgitters und der adsorbierten Moleküle induzierten Reaktionsvorgänge lassen sich idealerweise mit Hochfeld-THz-Strahlung im Frequenzbereich um 10 THz untersuchen, da diese Frequenz genau der Vibrationsfrequenz der adsorbierten Spezies entspricht. Ein weiteres Ziel besteht darin, die stark gerichtete, elektrische Feldstärke der THz-Strahlung zu nutzen, um chemische Reaktionen zu steuern. Durch eine geeignete Optimierung des Katalysatormaterials lässt sich der zu einer chemischen Reaktion notwendige Energieeinsatz deutlich reduzieren. Dafür bedarf es einer genauen Kenntnis des katalytischen Reaktionsprozesses in *operando*-Studien unter realistischen Einsatzbedingungen.

Derzeit sind die Analysen dieser Prozesse noch ohne oder mit nur geringer Ortsauflösung durchführbar. Es ist zu erwarten, dass durch die an Quellen der 4. Generation möglichen, höchst-ortsaufgelösten Messmethoden zusätzliche Informationen zugänglich werden, die zu einer weiteren Effizienzsteigerung von Katalysatoren führen. Paradebeispiele in diesem Feld sind alle mit der Wasserstofftechnologie verbundenen Prozesse der Energieumwandlung (Wasserspaltung, Brennstoffzelle, Methanolsynthese, etc.), die im Rahmen der Energiewende als Gegenmaßnahmen zum Klimawandel ins Auge gefasst werden.

#### 4.1.5 Transport- und Herstellungstechnologie

Auch in den Bereichen Transport- und Herstellungstechnologie sind weitere Fortschritte in Zukunft eng mit der Entwicklung neuer Materialien verknüpft. In diesen Bereichen wird eine präzise Einstellung und Kontrolle z.B. von Gefügebestandteilen auf der Nano-Ebene eine wichtige Rolle spielen, um neue leistungsfähigere Materialien wie ausscheidungshärtende Legierungen und Verbundwerkstoffe zu entwickeln bzw. die Prozesse und Kinetik zu deren Herstellung zu kontrollieren. Weitere wichtige Fragestellungen von hoher wirtschaftlicher Relevanz sind die Fragen nach den mikroskopischen Ursachen von Reibung bzw. Maßnahmen zu deren Verminderung in den verschiedensten Ausprägungen von Maschinenlagern oder zu deren Maximierung wie beim System Autoreifen – Straße (Abb. 4.2). Weiterhin spielt das Materialverhalten unter extremen Bedingungen, wie z.B. in Triebwerken oder chemischen Synthesereaktoren, eine entscheidende Rolle für den Wirkungsgrad der eingesetzten Antriebe und Prozesse. In allen diesen Fällen wird erwartet, dass feinfokussierte, intensive Strahlen harter Röntgenstrahlung entscheidende Informationen liefern werden, um die Entwicklung in diesem Bereich weiter voranzutreiben. Ein zunehmend wichtig werdender Aspekt in diesem Umfeld ist die additive Fertigung. Vor allem für sicherheitsrelevante Anwendungen, wie z.B. im Flug- und Fahrzeugbau, ist die Fehlerfreiheit von Komponenten von höchster Relevanz. Für die Qualitätskontrolle und zur Optimierung und Zertifizierung von Prozessparametern wird die höchstauflöste Röntgenanalyse von Bauteilen eine entscheidende Rolle spielen.

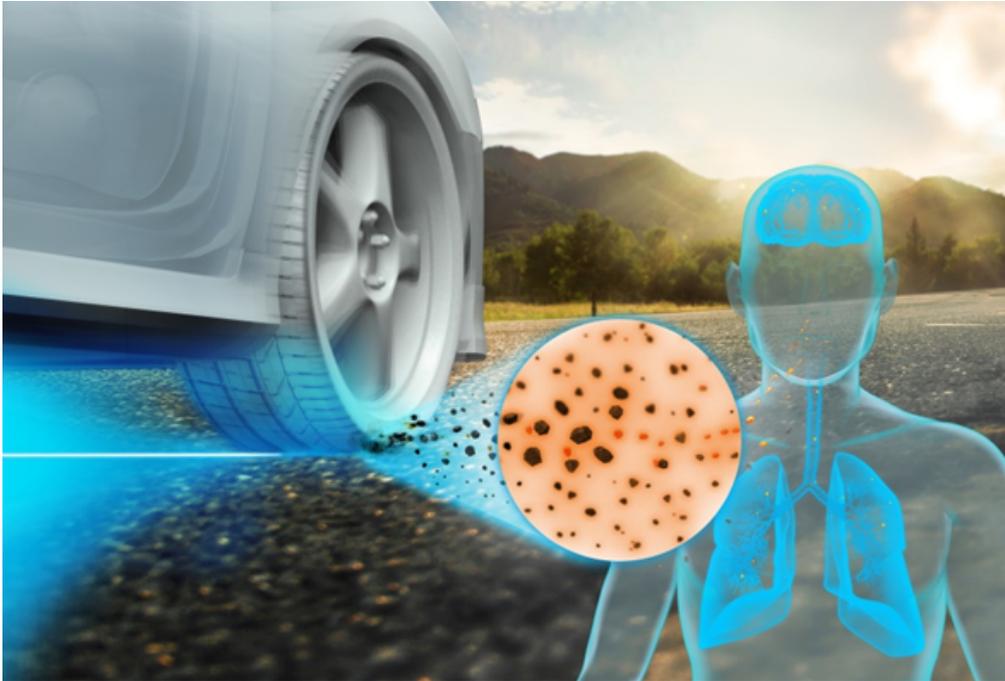


Abbildung 4.2: Die Reibung zwischen Oberflächen ist ein komplizierter Vorgang auf der Nanometerskala, der nicht nur schädliche Kleinstpartikel erzeugt, sondern durch Verschleiß von Bauteilen auch einen enormen wirtschaftlichen Schaden. Von einem tieferen Verständnis erhofft man sich, Reibung in Zukunft gezielt kontrollieren zu können. Für weniger Verschleiß, aber z.B. auch besseren Halt von Reifen bei Glatteis.

#### 4.1.6 Informationstechnologie

Die Erfolge in der Informationstechnologie sind eng mit den immer kleiner werdenden Strukturgrößen der Transistoren sowie der elektrischen Kontakte und Leiterbahnen in mikro- und nanoelektronischen Bauelementen verbunden. Dieser Prozess wird sich fortsetzen, bis man an physikalische Grenzen stoßen wird. Damit verbunden sind eine Reihe von Fragestellungen, für die hochbrillante Synchrotronstrahlungsquellen als diagnostische Werkzeuge wichtige Beiträge liefern können. Dies betrifft sowohl die Entwicklung neuer Generationen von Halbleiterbauelementen, z.B. für energieeffiziente, neuromorphe Systeme, als auch die Untersuchung von die Zuverlässigkeit begrenzenden Degradationsmechanismen in höchstzuverlässigen Bauelementen für die Automobilindustrie, z.B. für das autonome Fahren, für Drohnen und Roboter. Die Untersuchung dieser in Nanostrukturen ablaufenden kinetischen Prozesse – z.B. atomare Transportprozesse, die Elektromigrationsausfälle verursachen können – als auch die physikalische Fehleranalyse an diesen Halbleiterstrukturen, ist durch höherenergetische Synchrotronstrahlung zerstörungsfrei möglich. Hierfür werden entsprechende diagnostische Werkzeuge benötigt, die im Moment nicht zur Verfügung stehen, da der Durchsatz bestehender Röntgenmikroskope für derartige Aufgabenstellungen nicht ausreicht. Der oben bereits zitierte Faktor 100 - 1000 mehr an kohärentem Fluss an PETRA IV würde derartige Untersuchungen an industriellen Produkten ermöglichen. Hierbei geht es nicht nur um Grundlagenforschung zur weiteren Verbesserung der Leistungsfähigkeit und Ausfallsicherheit derartiger Bauelemente, sondern auch um eine Qualitäts- und Konformitätskontrolle der in einer der wenigen weltweit zur Verfügung stehenden Anlagen produzierten Halbleiterstrukturen.

Moderne Computer – ob nun Großrechner oder Laptop – werden immer schneller und effizienter. Damit sich diese Entwicklung auch in Zukunft fortsetzt, müssen Daten künftig noch schneller geschrieben und ausgelesen werden. Skyrmionen – stabile Wirbel in magnetischen Materialien – sind ein potenzieller Kandidat für Speichereinheiten der Zukunft. Zum Verständnis der Eigenschaften dieser Materialien sind neue Quellen wie BESSY III erforderlich, die kohärente Abbildungsverfahren im Weichröntgenbereich mit elliptischer Polarisation und höherer Ortsauflö-

sung dieser Objekte erlauben. Die Ausnutzung von Quanteneffekten hingegen bietet völlig neue Ansätze für eine disruptive Entwicklung in der Informationstechnologie. Es wird erwartet, dass extrem klein fokussierte, für den Anwendungszweck in der Photonenenergie abgestimmte Synchrotronstrahlung einen entscheidenden Beitrag zur dazu notwendigen Material- und Bauelemententwicklung leisten wird. Zurzeit werden mit Festkörperqubits aus konventionellen Halb- und Supraleitern enorme Fortschritte beim Quantencomputing erzielt. Die die Qubit-Kohärenz begrenzenden Prozesse werden hier mit Synchrotronstrahlung erforscht und mikroskopischen Materialeigenschaften zugeordnet. Für die nächste Generation von Qubits werden Materialien mit topologisch nicht-trivialen Eigenschaften (z.B. gestapelte 2D-Materialien) vorgeschlagen. Winkelaufgelöste Photoemission im Weichröntgenbereich (BES-SY III) stellt eine einzigartige Methode für die Bestimmung der Bandstruktur und somit für das Verständnis der Eigenschaften und das Design neuer, optimierter Materialien und Bauteile dar. Die effiziente Anwendung dieser Methode ist jedoch an bestehenden Quellen bisher nicht oder nur eingeschränkt möglich.

In ganz anderer Weise weist DALI die Richtung in eine neue Ära der Informationstechnologie. Grundlage dafür ist die Möglichkeit der kollektiven Anregung der Elektronen in neuesten funktionalen Materialien, bei denen die hohe Feldstärke zu nichtlinearen Effekten führt. So konnte bereits heute in Dirac-Materialien die Erzeugung höherer Harmonischer der fundamentalen THz-Frequenz um einen Faktor von sieben nachgewiesen werden. Dies zeigt einen Weg zu zukünftig deutlich höheren Datenübertragungsraten als mit den heutigen Technologien auf. THz-Strahlung ermöglicht darüber hinaus auch die Anregung der Nutation von Elektronenspins. Die Anregung dieser um einen Faktor 1000 über der Spinpräzession liegenden Rotation hat in einer späteren Anwendung bedeutenden Einfluss auf die Geschwindigkeit, Kompaktheit und Energieeffizienz zukünftiger Datenverarbeitung.

## 4.2 Zukünftige Anforderungen an international wettbewerbsfähige, beschleunigerbasierte Lichtquellen

Die technologischen Anforderungen, die sich aus den hier skizzierten Herausforderungen ableiten lassen – und deren Relevanz ebenfalls von der internationalen Nutzergemeinschaft unterstrichen wird –, erhöhen, zusammen mit den weltweit geplanten Modernisierungsmaßnahmen bestehender und dem Aufbau neuer Strahlungsquellen, massiv den Druck auf die drei Helmholtz-Zentren, die internationale Wettbewerbsfähigkeit ihrer Anlagen zu sichern. Diese ist unabdingbare Voraussetzung, um der akademischen und industriellen Nutzergemeinschaft in Deutschland die bestmöglichen Experimentierbedingungen und somit die Basis für bahnbrechende Ergebnisse zu bieten. Dafür ist es unerlässlich, dass die neue Generation komplementärer beschleunigerbasierter Lichtquellen in Kombination die folgenden Eigenschaften aufweist:

- Durchschlagende Verbesserung der räumlichen Auflösung für die Untersuchung heterogener Materialien auf allen relevanten Längenskalen in drei Dimensionen (3D-Röntgenspektroskopie bzw. -mikroskopie).
- Schaffung völlig neuer Möglichkeiten für *in-situ*- und *operando*-Experimente mit bisher unerreichter räumlicher und zeitlicher Auflösung zur Verfolgung chemischer und physikalischer Prozesse unter realistischen Prozess- oder Reaktionsbedingungen.
- Signifikante Erhöhung der zeitlichen Auflösung zur Untersuchung ultraschneller Reaktionen und Prozesse mit extrem kurzen Photonenpulsen und Schaffung der Möglichkeit, Strahlung effizient auf extrem kleine Strahlflecke zu fokussieren.
- Vollständige Abdeckung des gesamten Methodenspektrums und des damit verbundenen Photonenenergiebereichs, vom THz-Bereich für die Untersuchung von niederenergetischen Anregungen über weiche bis hin zu extrem harter Röntgenstrahlung für hochauflösende Materialfunktions- und Strukturstudien sowie für Untersuchungen in komplexen *in-situ*- und *operando*-Umgebungen.
- Implementierung und Kombination neuer komplementärer experimenteller Techniken (z.B. kryogene Elektronenmikroskopie, optische Techniken anderer Wellenlängenbereiche, laserbasierte Messmethoden) für die umfassende multimodale Untersuchung von Struktur, Dynamik und Funktion von Materie.

Neben den Herausforderungen in Bezug auf die notwendigen Anlagenparameter stellt die Erfassung, Speicherung und Auswertung der großen Datenmengen, die jetzt schon an vielen Synchrotron- und FEL-Strahlungsexperimenten auftreten, eine große Herausforderung dar. Diese Situation wird sich an den Quellen der nächsten Generation noch einmal deutlich verschärfen, insbesondere, da man für viele *in-situ*- und *operando*-Experimente auf eine schnelle erste Auswertung der Messdaten angewiesen ist, um die Fortführung der Experimente steuern zu können. Es wird erwartet, dass speziell für diese Fragestellungen auf künstlicher Intelligenz (KI) basierende Algorithmen in der Lage sein werden, einen signifikanten Beitrag zur Weiterentwicklung zu leisten. Verstärkte Digitalisierungsmaßnahmen unter Einsatz von KI-Algorithmen sind darüber hinaus erforderlich sowohl für die „intelligente“ Automatisierung der Anlagen im Hinblick auf die Realisierung von „Remote Access“-Betriebsmodi als auch für die vorausschauende Fehlerdetektion und Wartung zur Sicherung höchster Verfügbarkeit.

## 5 Roadmap für die Photonenquellen der Helmholtz-Gemeinschaft

Ziel der hier vorgestellten nationalen Strategie ist es, die Anforderungen an analytische Experimentiertechniken für Synchrotron- und FEL-Strahlung zur Lösung wichtig wissenschaftlicher und technischer Fragestellungen der jetzigen und zukünftigen Nutzerinnen und Nutzer aus Universitäten, außeruniversitären Forschungseinrichtungen (Helmholtz, Leibniz, MPG, FhG) und Industrie auf höchstem internationalen Niveau zu erfüllen, um so einen signifikanten Beitrag zur Stärkung des Wissenschafts- und Technologiestandorts Deutschland zu leisten und dessen Zukunftsfähigkeit auf diesem Gebiet weiter zu garantieren. Dies erfordert die Abdeckung eines weiten Methodenspektrums und damit verbunden des gesamten Photonenenergiebereichs, von der THz-Strahlung über den weichen bis in den sehr harten Röntgenbereich.

Gerade bei Röntgenanwendungen wird die Fokussierbarkeit der Strahlung auf extrem kleine Punkte zunehmend wichtiger. Dies resultiert insbesondere aus der Nachfrage nach analytischen Möglichkeiten auf der Nanometer-Skala zur Untersuchung von Proben, die auf dieser Längenskala Heterogenität aufweisen, was in Fragestellungen aus den verschiedensten Forschungsgebieten wie der Physik, Chemie, Materialforschung, Biologie und Medizin, Umweltwissenschaften und Untersuchungen unseres kulturellen Erbes zunehmend der Fall ist (siehe auch Kapitel 4). Die effiziente Fokussierung der Röntgenstrahlen der neuen Quellen wird möglich durch eine transformative neue Entwicklung in der Beschleunigertechnologie, der sog. *Multi-Bend-Achromat*-Technologie (MBA). Diese erlaubt es, den Elektronenstrahl im Speicherring auf einen wesentlich kleineren Querschnitt zu konzentrieren, woraus ein dramatischer Anstieg in der Leuchtdichte der erzeugten Strahlung folgt. Dadurch wird die Nanometer-ortsaufgelöste Bestimmung nahezu aller mit Strahlung bestimmbarer Eigenschaften der Materie möglich. Aus diesem Grund werden diese Quellen der nächsten Generation auch oft als 3D-Röntgenmikroskope bezeichnet.

Um den wissenschaftlichen und sich daraus ergebenden technischen Anforderungen in dem sich sehr dynamisch entwickelnden Bereich der Photonenforschung unter Berücksichtigung der neuesten Schlüsseltechnologien gerecht zu werden, plant der Forschungsbereich MATERIE der Helmholtz-Gemeinschaft folgende Maßnahmen:

- Ausbau der bestehenden Nutzeranlage PETRA III zu PETRA IV, einem Speicherring mit ultrakleiner Emittanz für röntgenmikroskopische Anwendungen und Streumethoden im harten Röntgenbereich mit Schwerpunkt auf der Untersuchung der atomaren Struktur und Funktion von Materie und Materialien, mit einer lateralen Auflösung von makroskopischen Dimensionen bis in den Nanometerbereich.
- Realisierung von BESSY III als beschleunigerbasierte Lichtquelle für den weichen Röntgenbereich, optimiert für die Untersuchung elektrisch/elektronischer Eigenschaften funktioneller Materie und Materialien auf Basis spektroskopischer Methoden mit hoher Ortsauflösung bis in den Nanometerbereich.
- Realisierung von DALI als moderne, leistungsstarke und kombinierte THz- und VUV-Quelle mit kontinuierlichem Betrieb (CW) für die Untersuchung kollektiver, niederenergetischer Anregungen in funktioneller Materie, bei denen Anregungsphänomene, optische Nichtlinearitäten oder eine hohe Zeitauflösung im Vordergrund stehen.
- Upgrade von FLASH im Rahmen des FLASH2020+-Projekts zur signifikanten Verbesserung der Strahlparameter und des Parallelbetriebs der zwei FEL-Teilanlagen zur Untersuchung der ultraschnellen Dynamik atomarer und molekularer Anregungen mit XUV- und weicher Röntgenstrahlung hauptsächlich mittels spektroskopischer Methoden.

- Beiträge zur Entwicklung des international betriebenen Röntgenlasers European XFEL zur Untersuchung der atomaren Struktur, Dynamik und Funktion von Materie auf ultra-kurzen Zeitskalen mittels Anwendungen hauptsächlich im harten Röntgenbereich.

Wie oben ausgeführt, basiert die vorgestellte Strategie auf folgenden Elementen:

- Die derzeitige Komplementarität zwischen den Speicherringquellen BESSY und PETRA in den Hauptanwendungsbereichen und damit verbunden in den angebotenen Photonenenergiebereichen (siehe Abb. 5.1) soll auch in Zukunft beibehalten werden. BESSY III wird sich dabei weiterhin auf den weichen Röntgenbereich mit vorwiegend spektroskopischen Anwendungen zur Bestimmung der elektronischen Eigenschaften von Materialien konzentrieren. Komplementär dazu wird PETRA IV den harten Röntgenbereich abdecken, der vor allem zur Bestimmung der atomaren Struktur und Dynamik mittels Streu- und diffraktiver Methoden und für bildgebende und tomographische Verfahren genutzt wird.
- DALI adressiert ein komplementäres Anwendungs- und Methodenspektrum und wird das Studium von Proben unter dem Einfluss hoher lokaler elektromagnetischer Felder ermöglichen, mit denen z.B. niederenergetische, kollektive Anregungen untersucht werden können.
- Komplementär zu den Speicherringquellen, die in der Regel eine Zeitauflösung bis in den sub-Nanosekundenbereich ermöglichen, erlauben FELs eine um ca. vier Größenordnungen bessere Zeitauflösung bis in den Femtosekundenbereich und darunter. Damit lassen sich ultraschnelle Prozesse und Nichtgleichgewichtszustände, wie diejenigen während chemischer Reaktionen, sowohl in den atomaren, elektronischen Eigenschaften mittels weicher Röntgenstrahlung (FLASH) als auch auf der Ebene atomarer Positionen mittels härterer Röntgenstrahlung (European XFEL) vermessen. Die extrem hohe Einzelpulsintensität der FELs erlaubt zudem so genannte Einzelschussexperimente, bei denen die gesamte Information durch die Belichtung der Probe mit einem einzelnen Photonenpuls durchgeführt werden kann.

Die Strategie zur Erreichung dieser Ziele berücksichtigt die Analysen zur wissenschaftlichen Bedeutung der mit den Anlagen assoziierten Forschungsfelder, die aktuellen und zukünftigen Bedarfe der jeweiligen Nutzergemeinschaften (siehe auch Kapitel 4) sowie die verschiedenen Ausbauszenarien im Hinblick auf technische Machbarkeit und erforderliche Investitionen.

Auf der europäischen Ebene hat sich im Jahr 2017 ein Konsortium namens **League of European Accelerator-based Photon Sources (LEAPS)** gegründet, an der alle beschleunigerbasierten Photonenquellen in Europa beteiligt sind. Innerhalb von LEAPS werden mehrere Ziele verfolgt:

1. Gemeinsame Plattformen für zukünftige technische Entwicklungen, um Kräfte zu bündeln und Synergien auszunutzen. Dies beinhaltet sowohl Entwicklung von Instrumentierung und Technologien als auch von Algorithmen und Computerprogrammen.
2. Etablierung eines gemeinsamen Sprachrohrs gegenüber der EU.
3. Entwicklung einer europäischen Strategie für die Weiterentwicklung der beschleunigerbasierten Photonenquellen in Europa und deren Experimentierstationen. Dies beinhaltet auch einen „smart specialisation“ genannten Prozess zur Abstimmung spezieller Experimentiertechniken auf der europäischen Ebene mit dem Ziel, eine größtmögliche Komplementarität der Anlagen in Europa zu erreichen.

Die Konzepte und Ausrichtung der in dieser Roadmap vorgestellten Modernisierung der nationalen Helmholtz-Quellen wurden innerhalb von LEAPS diskutiert und werden kontinuierlich mit den Plänen der anderen europäischen Quellenbetreiber abgeglichen. Entsprechend fügt sich die hier dargelegte Strategie auch in die Pläne des europäischen Umfelds ein.

Für die Realisierung von PETRA IV, BESSY III und DALI müssen eine Reihe von technischen Neuentwicklungen an der Grenze des derzeit Machbaren getätigt werden. Diese Entwicklungen werden in enger Kollaboration zwischen den beteiligten Zentren, hoch spezialisierten Technologieunternehmen und auf europäischer Ebene im Rahmen

von LEAPS durchgeführt. Hierbei wird die bewährte und langjährige Zusammenarbeit im Bereich der Röntgenoptiken, Beschleunigertechnologie und Datenmanagement im Rahmen der Helmholtz-Programme „From Matter to Materials and Life“ (MML) und „Matter and Technology“ (MT) weitergeführt werden.

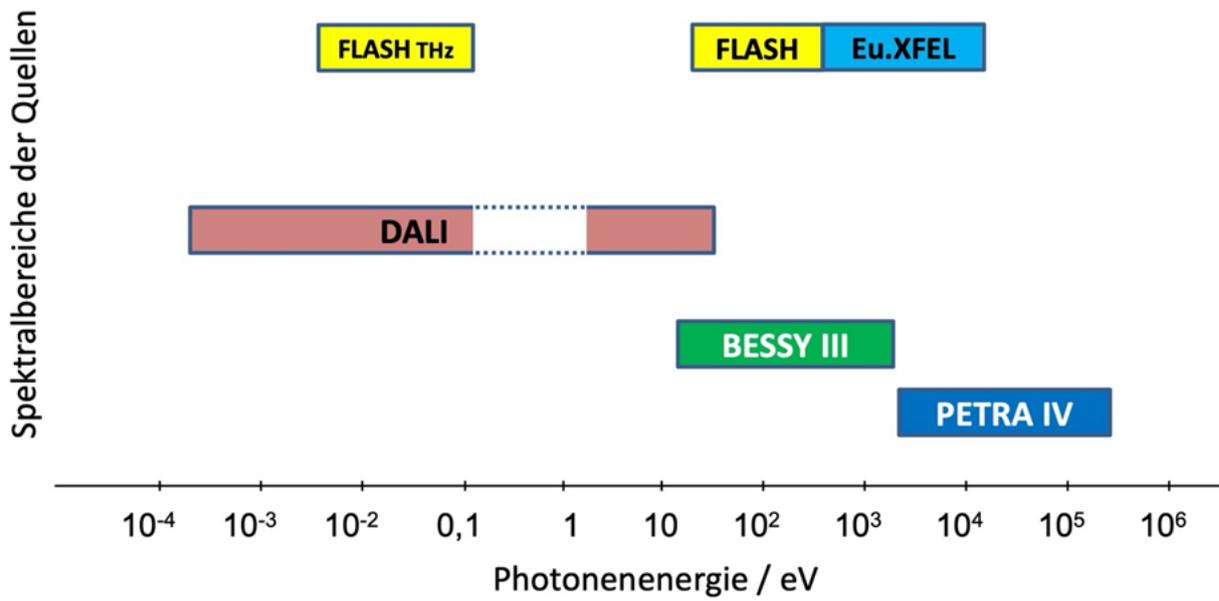


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung der Kernphotonenenergiebereiche der von der Helmholtz-Gemeinschaft betriebenen und geplanten Synchrotron- und FEL-Strahlungsquellen, einschließlich des European XFEL. Die komplementären Photonenergiebereiche der Quellen BESSY II/III und PETRA III/IV werden durch die Upgrades beibehalten. Die komplementären Betriebsarten DALI (CW-Betrieb) und FLASH (Pulsfolgenbetrieb) für VUV/Soft-X Pump & Probe-Sonden-Experimente erhöhen die Vielfalt der möglichen Anwendungen erheblich. Die erreichbare Zeitauflösung an Speicherring-quellen reicht bis in den sub-Nanosekundenbereich. Mit den FELs (FLASH und European XFEL) ist man in der Lage, bis in den sub-10-Femtosekundenbereich vorzustoßen.

## 5.1 Kurzbeschreibung der einzelnen Ausbaumaßnahmen

Der zentrale Bestandteil des **PETRA IV**-Projekts ist, die bestehende Magnetanordnung des Speicherrings durch eine neue („Multi-Bend-Achromat“) zu ersetzen, die eine um den Faktor 50 – 100 mal kleinere horizontale Emittanz des gespeicherten Elektronenstrahls und damit eine 100 – 1000 mal höhere spektrale Helligkeit/Brillanz ermöglichen wird. Wie die jetzige 2.3 km lange Anlage soll PETRA IV bei einer Elektronenenergie von 6 GeV betrieben werden, wodurch eine hochbrillante Synchrotronstrahlung für Experimente im mittleren und harten Röntgenbereich (Photonenergie: 2.5 – >150 keV) zur Verfügung stehen wird. Um die neuen Strahleigenschaften optimal nutzen zu können, muss das Portfolio von Experimentierplätzen an diese angepasst werden. Aus diesem Grund und wegen der Geometrie des neuen Speicherringdesigns ist der Bau einer weiteren Experimentierhalle notwendig.

Darüber hinaus sollen im Rahmen des PETRA IV-Projektes auch eine Reihe von technischen Neuerungen als zusätzliche Alleinstellungsmerkmale eingeführt werden. Parallel zum traditionellen Vorbeschleuniger für den 2.3 km langen Speicherring soll weltweit erstmalig ein auf dem „plasma wake field“-Prinzip basierender Vorbeschleuniger realisiert werden, um Betriebserfahrung mit dieser revolutionären Beschleunigertechnologie unter realen Einsatzbedingungen sammeln zu können. Um die einzigartigen Parameter des Elektronenstrahls am neuen Speicherring auch optimal in Photonenstrahlen umsetzen zu können, sollen neben den etablierten Undulator-technologien im Rahmen des TDRs und der Vorbereitungsphase auch die Möglichkeiten von Undulatoren mit kryogenisch gekühlten Magneten und mit supraleitenden Magnetspulen untersucht und in Bezug auf die geplanten Anwendungen bei

PETRA IV bewertet werden.

Das analytische Potenzial von PETRA IV ist ein zentraler Bestandteil des Science Campus Bahrenfeld mit den Forschungszentren CFEL, CSSB, CXNS, CHyN, HARBOR und dem geplanten CMWS, dem EMBL, der MPG, den universitären Partnern UHH, TUHH und CAU Kiel, den Helmholtz-Partnern HZG, HZI und FZJ, sowie verschiedenen Instituten der Leibniz-Gemeinschaft. Die detaillierten Anforderungen an die Parameter des PETRA IV-Speicherrings und die Ausgestaltung der Experimentierstationen werden in enger Kollaboration mit allen PETRA III- und Campus-Partnern und der nationalen und internationalen Nutzergemeinschaft im Rahmen von Workshops auch unter Aspekten der Innovation und der Nutzung durch die Industrie erarbeitet. Die strategische Einordnung von PETRA IV auf europäischer Ebene in Bezug auf Komplementarität und intelligente Spezialisierung der Experimentiertechniken wird im Rahmen von LEAPS diskutiert.

Der CDR für das PETRA IV-Projekt wurde Ende 2019 abgeschlossen und publiziert, die Arbeiten für einen detaillierten TDR haben begonnen und sollen bis Ende 2022 abgeschlossen sein. Bei einer anschließenden Genehmigung könnte der Nutzerbetrieb nach einer Betriebsunterbrechung von ca. zwei Jahren im Jahr 2027 wieder aufgenommen werden. Der Ausbau von PETRA III zu PETRA IV wird Deutschland auf absehbare Zeit eine weltweite Spitzenstellung auf dem Feld der speicherringbasierten Forschung mit härterer und hochenergetischer Synchrotronstrahlung garantieren und den Forscherinnen und Forschern aus Deutschland und Europa die weltweit besten Strahlbedingungen für ihre Experimente zur Verfügung stellen und somit einen deutlichen Beitrag zum Wissenschafts- und Innovationsgeschehen im Land zu liefern.

Die Synchrotronstrahlungsquelle **BESSY III** wird mit ihrer Optimierung für spektroskopische Methoden die Charakterisierung und wissenschaftsbasierte Optimierung von höchsteffizienten Materialien und Materialsystemen ermöglichen, wie sie zur Lösung der großen gesellschaftlichen Herausforderungen erforderlich sind.

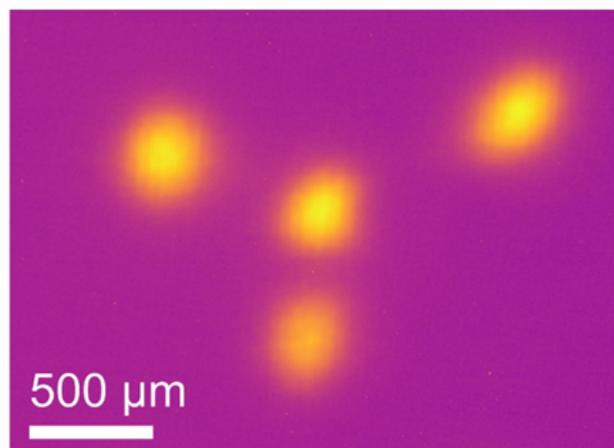


Abbildung 5.2: Abbild der BESSY II-Strahlungsquellpunkte im Zwei-Orbit-Modus. Der zweite Orbit windet sich um den Standardorbit im Zentrum und schließt sich nach drei Umläufen (entsprechend den 3 äußeren Punkten). Die verschiedenen Orbits erlauben es, unterschiedliche Nutzerexperimente mit dem jeweils passenden Licht gleichzeitig zu versorgen.

Wissenschaftliche Schwerpunkte sind dabei die Umwandlung, Speicherung und Nutzung von Energie sowie die energieeffiziente Informationstechnologie. Die Beugungsbegrenzung der Quelle ermöglicht dabei einzigartige Einblicke in den Transport von Elektronen und Ionen durch Grenzflächen sowie katalytisch unterstützte chemische Reaktionen. In Kombination mit dedizierten Probenumgebungen erlaubt BESSY III *in-situ*- und *operando*-Untersuchungen von der Nano- bis zur Makrodimension und von extrem kurzen Zeitskalen bis hin zu stationären Zuständen.

Die Profilierung von BESSY II bei der Entwicklung und Nutzung zeitaufgelöster spektroskopischer Methoden an Speicherringen wird an BESSY III weiter vorangetrieben. Der an BESSY II entwickelte Zwei-Orbit-Modus (Abb. 5.2), bei dem einzelne Elektronenpakete auf verschiedenen Bahnen laufen, bietet die Möglichkeit, gleichzeitig unterschiedliche Nutzerexperimente mit dem jeweils passenden Licht zu versorgen, z.B. Licht mit einem

ultraschnellen Wechsel der Helizität, um neue Einblicke in Schaltprozesse in magnetischen Materialien zu erhalten.

Die weltweit anerkannte Expertise des HZB bei der Entwicklung einzigartiger Betriebsmodi von Speicherringen, Beschleunigertechnologien, Undulatoren, Präzisionsoptiken, Strahlrohren und Probenumgebungen ist Grundlage dafür, auch an BESSY III der internen und externen Nutzerschaft unikale Experimentiermöglichkeiten anzubieten. Beispiele hierfür sind innovative Undulatorkonzepte für die Erzeugung von weicher und mittlerer Röntgenstrahlung in einem Gerät, neuartige Optiken und Monochromatoren zur Abdeckung des gesamten Energiebereichs, Probenumgebungen für die *in-situ*- und *operando*-Charakterisierung von elektrochemischen Prozessen und KI-unterstützte Methoden der Maschinen- und Instrumentenüberwachung und -optimierung. Die Einbettung dieser Entwicklungen in das HZB-Forschungsprogramm und die Forschung der strategischen Partner garantiert dabei einen wissenschaftsgetriebenen Ansatz.

Zusammen mit den strategischen Partnern MPG und PTB hat sich das HZB als international sichtbares Forschungszentrum der Energie- und Katalysatorforschung bzw. der Metrologie mit Synchrotronstrahlung etabliert. Die Anforderungen und Bedarfe dieser Partner sind wesentlich für die Definition der Betriebsparameter von BESSY III, das nach Planung der PTB auch um die Nachfolgeeinrichtung MLS II der PTB-eigenen Metrology Light Source (MLS) ergänzt werden soll. Eine zwischen HZB und PTB abgestimmte, komplementäre Optimierung und gemeinsame Nutzung der beiden Quellen würde die Möglichkeit bieten, diese gezielt entlang der jeweiligen Anforderungen zu profilieren sowie Synergien bei Planung, Bau und Betrieb auszuschöpfen.

Wesentlicher Bestandteil der BESSY III-Anlage werden ergänzende experimentelle Infrastrukturen und Labore zur Herstellung und komplementären Charakterisierung von Materialien sein. Hierdurch wird BESSY III als führende Facility für weiche und mittelharte Röntgenstrahlung in Europa – und komplementär zu anderen Quellen – auf dem Technologie-Campus Adlershof einzigartige Möglichkeiten für Forschung und Industrie am Wissenschafts- und Hochtechnologiestandort Deutschland schaffen. Dabei soll BESSY III die hocheffiziente Nutzung der Mess- und Experimentierzeit ermöglichen und weitgehend klimaneutral und nachhaltig betrieben werden. Der CDR für das BESSY III - Projekt soll in 2022 fertiggestellt werden, der sich anschließende TDR in 2025. Der Nutzerbetrieb an BESSY III wäre dann ab 2032 möglich.

Aus der großen Nachfrage nach Strahlzeit an den Messplätzen für THz-Strahlung an der seit 2014 am HZDR in Betrieb befindlichen Forschungsinfrastruktur ELBE erwuchs die Idee für einen Nutzerworkshop, in dem die Diskussion zukunftsweisender Science Cases und der daraus resultierenden Anforderungen an eine geeignete Strahlungsquelle die zentralen Themen waren. Die **Dresden Advanced Light Infrastructure (DALI)** stellt die Antwort des HZDR auf diese Visionen dar. Um die herausfordernden Wünsche der Nutzerinnen und Nutzer zu bedienen, ist eine ganz neue Beschleunigerarchitektur erforderlich. Sie basiert auf zwei supraleitenden Elektronenbeschleunigern, die Strahlen einer Energie von 50 bzw. 300 MeV generieren. Die beschleunigten Elektronenpakete können schmalbandige und breitbandige THz- sowie Vakuum-Ultraviolett-Strahlung erzeugen. Ergänzt wird dieses Portfolio an Strahlung verschiedenster Charakteristik durch eine weltweit einzigartige, polarisierte Positronenquelle sowie durch einen Messplatz für Experimente mit ultraschneller Elektronenbeugung. Eine Vielzahl spezialisierter Nutzerlabore schafft ein hervorragendes Forschungsumfeld für Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus den Materialwissenschaften, der Physik, Chemie, Materialforschung, Biologie und Medizin sowie aus den Umweltwissenschaften. Die Forschungsthemen reichen von der Hochtemperatur-Supraleitung, der Untersuchung nicht-linearer kollektiver Anregungen von Elektronensystemen mit großer Bedeutung für schnelle Datenverarbeitung über die Rolle von Wasser in Lebensprozessen, das Schalten von Prozessen in Zellmembranen und der Steuerung chemischer Reaktionen bis zur Untersuchung der Ausbreitung von Radionukliden und Schwermetallen in Pflanzen und in der Nahrungskette. Von bahnbrechender Bedeutung sind dabei einerseits die extrem hohen Feldstärken der THz-Strahlung und andererseits die Möglichkeit, THz-Strahlung mit Vakuum-UV und ultraschnellen Elektronenstrahlen zu kombinieren. Ein vorläufiger CDR („preliminary CDR“) für das Projekt wurde 2020 erstellt, die Weiterentwicklung zu einem vollen CDR läuft derzeit. Die Aufnahme der Nutzerbetriebs könnte in 2030 erfolgen.

Eingebettet ist DALI einerseits in den Campus des HZDR am Standort Dresden-Rossendorf und darüber hinaus in den vielfältigen Wissenschaftsstandort Dresden, der mit der Exzellenzuniversität TU Dresden und einer Vielzahl

von außeruniversitären Forschungseinrichtungen der Max-Planck-Gesellschaft, Fraunhofer-Gesellschaft und Leibniz-Gemeinschaft ein einzigartiges Umfeld bietet.

Das **FLASH2020+**-Projekt stellt eine innovative Modernisierung der bestehenden FLASH-Anlage (bestehend aus den beiden FEL-Undulatoren FLASH1 und FLASH2) dar, die auf die Erzielung verbesserter spektraler Strahleigenschaften sowie eines effizienteren Betriebs abzielt. Neben einer moderaten Erhöhung der Elektronenenergie des Linearbeschleunigers wird der 20 Jahre alte FEL-Undulator bei FLASH1 durch Undulatoren mit variablem Magnetabstand zur leichteren Änderung der Photonenenergie ersetzt, um den Parallelbetrieb der beiden FEL-Teilanlagen FLASH1 und FLASH2 effektiver gestalten zu können. Zur Verbesserung und Kontrolle der zeitlichen und spektralen Photonenpulseneigenschaften wird zudem ein „Seeding“ des FELs mittels eines leistungsstarken optischen Lasers implementiert, was insbesondere für spektroskopische Untersuchungen auf ultrakurzen Zeitskalen von Vorteil ist. Ein Alleinstellungsmerkmal von FLASH ist die Nutzung eines supraleitenden Linearbeschleunigers. Die dadurch mögliche, um einen Faktor von mehr als 100 höhere Pulswiederholrate im Vergleich zu den meisten anderen FELs ist essenziell für alle Experimente an hochverdünnten Proben, wie dies bei der Untersuchung der Reaktion von Gasen (z.B. Experimente zur Atmosphärenchemie) notwendig ist. Gleiches gilt auch für solche Experimente, in denen mehrere Nachweiskanäle in Koinzidenz ausgewertet werden müssen und/oder die entsprechenden Signalraten sehr niedrig sind.

Für das Projekt FLASH2020+ liegt bereits ein CDR vor. Die Arbeiten am TDR für die erste Phase haben begonnen. Die Aufrüstung der Anlage zur Erhöhung der Beschleunigerenergie ist ab Ende 2021 geplant. Ende 2024 soll ein großer Teil der Arbeiten mit der anschließenden Inbetriebnahme der neuen FEL-Betriebsarten abgeschlossen sein.

Für den **European XFEL** werden auf verschiedenen internationalen Workshops sowohl die wissenschaftlichen Schwerpunkte als auch die entsprechende Instrumentierung der beiden verbleibenden freien FEL-Tunnel des Röntgenlasers sowie die Option eines gleichförmig gepulsten (CW) Betriebs des Linearbeschleunigers diskutiert und untersucht. Eine gleichmäßige Pulsfolge hätte erhebliche Vorteile für eine große Anzahl von Experimenten. Weiterhin wird auch der Bau eines zweiten Fächers der FEL-Undulator-Strahlführungen in Betracht gezogen, entsprechend des genehmigten Vorschlags im ersten Planfeststellungsverfahren zu Beginn des XFEL-Projekts. Angestrebt wird die optimale Nutzung der hohen Pulswiederholraten der supraleitenden Beschleunigertechnologie, welche den Durchsatz der Experimente am European XFEL deutlich erhöhen würde.

## 5.2 Neue Konzepte für den Nutzerbetrieb

Im Rahmen der geplanten Modernisierungsprojekte soll weiterhin in einer Digitalisierungsstrategie nicht nur ein autonomer Beschleunigerbetrieb, sondern auch ein großer Teil vollautomatischer Experimentierstationen realisiert werden, um einen Fernzugriff („remote access“) der Nutzerinnen und Nutzer auf deren Experimente zu ermöglichen. Dadurch wird sich zum einen der Durchsatz von standardisierten Experimenten erhöhen lassen. Zum anderen wird dies die Reiseaktivitäten der Nutzerinnen und Nutzer auch zu normalen Zeiten minimieren und sich so, bis zu einem gewissen Grad, ein sicherer Nutzerbetrieb auch unter den Bedingungen wie denen einer Pandemie besser aufrechterhalten lassen. Dieser Betriebsmodus läuft unter dem Schlagwort „mail-in“-Experimente. Zudem werden begleitende Maßnahmen im Bereich der Detektortechnik sowie Maßnahmen zur Erfassung, Verwaltung und Analyse großer Datenmengen erforderlich sein, um das Potenzial der neuen Quellen voll auszuschöpfen. Für die schnelle Datenanalyse vor allem während *in-situ*- und *operando*-Experimenten und für den Betrieb der Speicherringe sollen innovative Lösungen aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz, insbesondere des maschinellen Lernens, etabliert werden.

## 6 Internationaler Kontext und Leistungsvergleich

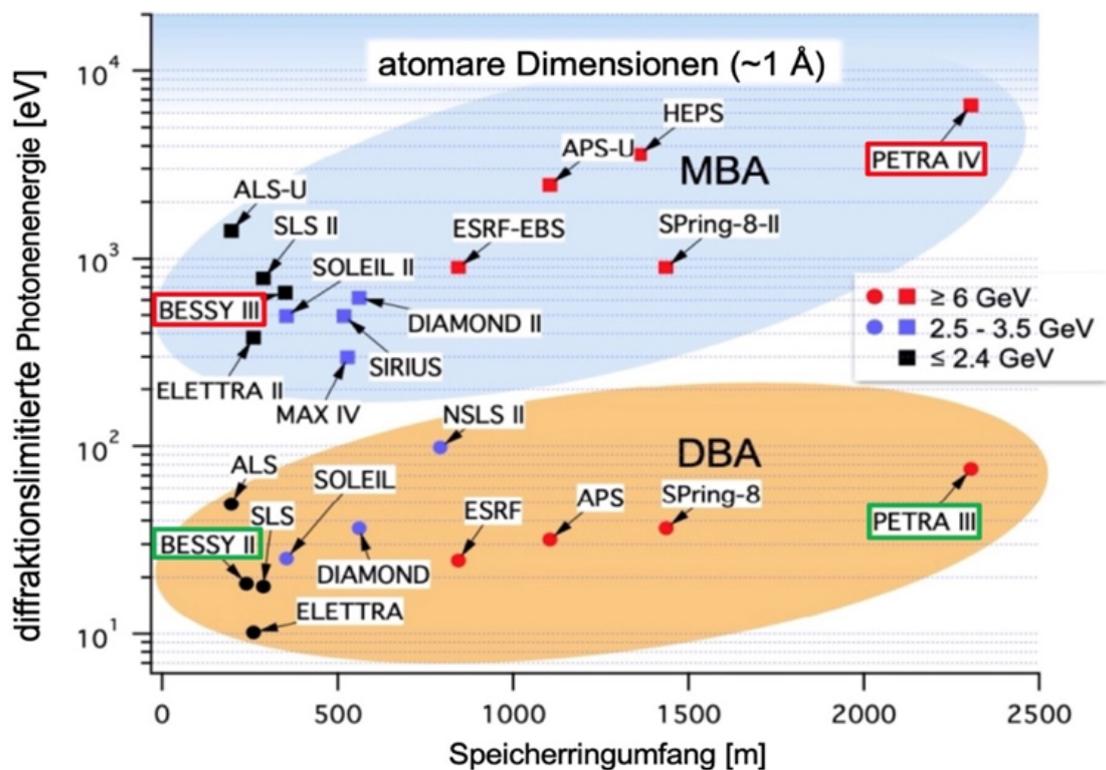


Abbildung 6.1: Darstellung der Photonenergie, bis zu der eine Quelle beugungsbegrenzt ist, d.h. bis zu der Photonenergie die theoretisch mögliche Brillanz erreicht wird, als Funktion des Umfangs. DBA: Double-Bend-Achromat, Quellen der 3. Generation; MBA: Multi-Bend-Achromat, Quellen der 4. Generation. DALI ist hier, da kein Speicherring, nicht aufgeführt (ein internationaler Vergleich ist in Tabelle 6.3 zu finden).

In der Forschung an beschleunigerbasierten Photonquellen hat Deutschland in den sechziger Jahren des letzten Jahrhunderts Pionierarbeit geleistet. Weltweit erste Experimente wurden bereits 1964 am DESY-Synchrotron in Hamburg durchgeführt. Seither konnte Deutschland seine Führungsposition weiter ausbauen (siehe Kapitel 2). Aus den Erfahrungen der letzten Jahrzehnte zeigt sich, dass diese Großforschungsanlagen nicht nur grundlegend sind für eine Vielzahl von Forschungsdisziplinen, sondern auch Attraktoren für herausragende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sowie ideale interdisziplinäre Forschungs- und Ausbildungs-Plattformen für den wissenschaftlichen Nachwuchs. Deshalb hat die weltweite Konkurrenz bei beschleunigerbasierten Photonquellen in den letzten 20 Jahren enorm zugenommen: In den USA und in Asien sind beschleunigerbasierte Photonquellen heute ein wichtiger Teil der Hightech-Strategie und werden kontinuierlich auf den neuesten Stand ausgebaut. Um hier auch in Zukunft eine international führende Position zu halten, bedarf es daher einer nationalen Kraftanstrengung, die bestehenden Quellen auf einen zukunftsfähigen Stand der Technik zu bringen. Durch die Entwicklung neuer, disruptiver Konzepte in der Beschleunigertechnologie stehen die speicherringbasierten Photonquellen am Anfang einer

neuen Ära ihrer Leistungsfähigkeit. Die sogenannte Multi-Bend-Achromat (MBA)-Technologie, welche erstmalig beim Bau von MAX IV zur Anwendung kam und bei der Modernisierung der ESRF umgesetzt wurde, verbessert die Elektronenstrahlparameter derart, dass eine um Größenordnungen höhere Leuchtdichte der Photonenstrahlen erreicht wird.

Dieser disruptive Sprung in der Strahlqualität der Quellen öffnet die Tür für völlig neuartige Möglichkeiten in der Analytik der Funktionsweise und Struktur der Materie und zeigt sich deutlich in Abbildung 6.1, in der die beugungsbegrenzte Photonenenergie gegen den Umfang des Speicherrings aufgetragen ist, bis zu der der Röntgenstrahl beugungsbegrenzt ist, d.h. die Speicherringquelle ihre maximal mögliche Brillanz erreicht. Die Quellen der 3. Generation wie BESSY II und PETRA III liegen in dem mit „DBA“ (Double-Bend-Achromat) gekennzeichneten Bereich. Von diesen trennt sich deutlich der Bereich der Quellen der 4. Generation mit ihren überlegenen Strahleigenschaften, die auf der Multi-Bend-Achromat-Technologie („MBA“) beruhen. Weltweit planen nahezu alle bestehenden Speicherringquellen entsprechende Modernisierungsmaßnahmen und neue Quellen werden ausschließlich mit der MBA-Technologie gebaut. Mit dem Ziel, eine gemeinsame, abgestimmte Strategie für die Modernisierung der europäischen Quellen zu entwickeln und Synergien bei technischen Entwicklungen und Umsetzungen zu nutzen, wurde unter deutscher Führung das Konsortium der europäischen beschleunigerbasierten Strahlungsquellen (LEAPS, siehe Kapitel 5) gegründet.

Die wichtigsten Quellen und deren Modernisierungspläne in Europa, USA und Asien sind in den Tabellen 6.1 und 6.2 zusammengefasst.

Land	Name	Art	Energie [GeV]	Upgrade (Emittanz)
USA	APS	Speicherring	7,0 → 6,0	APS-U (40 pm)
	ALS	Speicherring	1,9 → 2,0	ALS-U (70 pm)
	LCLS II	X-ray FEL, SC-CW linac	4,0	Neuer FEL
	LCLS II HE	X-ray FEL, SC-CW linac	8,0	Geplanter Upgrade LCLS II
Japan	SLIT-J	Speicherring	3,0	Neue SR-Quelle (1 nm)
	Spring8	Speicherring	8,0 → 6,0	Spring8-II (140 pm)
China	HEPS	Speicherring	6,0	Neue Quelle (59 pm)
	SHINE	X-ray FEL, SC-CW-linac	8,0	Neuer FEL

Tabelle 6.1: Übersicht über die wichtigsten beschleunigerbasierten Photonenquellen in den USA und Asien, die entweder modernisiert oder neu gebaut werden. Durch einen Pfeil ist eine geplante Änderung der Elektronenenergie bei einer Modernisierung angedeutet. Je kleiner die Emittanz, desto höher ist die erreichbare Leuchtdichte. („SC“: supraleitend; „CW“: gleichförmiger Pulsbetrieb)

Durch die Konzeption als supraleitender CW-Anlage, die extrem große Parameter- wie Frequenzbereiche bedient, stellt DALI eine große Herausforderung an modernste Beschleunigertechnologie dar, die nur durch ein innovatives Konzept bedient werden kann. Die Kombination von Quellen bis hin zu der möglichen Anknüpfung an das benachbarte Hochfeld-Magnetlabor HLD und an die Hochleistungslaser DRACO und PENELOPE sowie die Einbettung in die Wissenschaftsstadt Dresden werden DALI zu einer weltweit einzigartigen Anlage machen. Mit ELBE, an der die supraleitende Beschleunigertechnologie zuerst entwickelt wurde, und der THz-Pilotanlage TELBE an ELBE verfügt das HZDR über die erforderliche Expertise, um eine Anlage wie DALI zu bauen. Die Einzigartigkeit auch schon von ELBE als supraleitendem CW-Beschleuniger zog bereits in der Vergangenheit exzellente internationale

Land	Name	Art	Energie [GeV]	Upgrade (Emittanz)
Frankreich	ESRF	Speicherring	6,0	ESRF-EBS (130 pm)
Schweden	MAXIV	Speicherring	3,0	Neue Quelle (200 pm)
England	DIAMOND	Speicherring	3,0 (3,5)	DIAMOND-II (130-160 pm)
Italien	Elettra	Speicherring	2,0	Elettra 2.0 (250 pm)
Frankreich	Soleil	Speicherring	2,75	Soleil-II 2.0 (70 pm)
Schweiz	SLS	Speicherring	2,4 → 2,7	SLS 2.0 (130 pm)
Deutschland	PETRA III	Speicherring	6,0	PETRA IV (<20 pm)
Deutschland	BESSY II	Speicherring	1,7 → 2,5	BESSY III (≤150 pm)
Deutschland	FLASH	Soft X-ray FEL	1,25 → 1,35	FLASH2020+ (tunable, seeded)

Tabelle 6.2: Übersicht über die wichtigsten beschleunigerbasierten Photonenquellen in Europa, die gerade gebaut oder modernisiert werden. Durch einen Pfeil ist eine geplante Änderung der Elektronenenergie bei der Modernisierung angedeutet.

Beschleunigerphysiker/-innen an, die nun das Konzept für DALI entwickelt haben und die das zu dessen Aufbau und Betrieb erforderliche Potenzial mitbringen. Der Vergleich mit den weltweit derzeit im Betrieb befindlichen, geplanten oder im Aufbau befindlichen THz-Quellen, dargestellt in Tabelle 6.3, belegt die herausragende, zukünftige Stellung von DALI.

Im Folgenden werden die vorgeschlagenen Modernisierungen der deutschen Quellen kurz im **internationalen Kontext** betrachtet:

Nach derzeitigem Planungsstand wird **PETRA IV** in den für die Experimente relevanten Leistungsparametern im härteren Röntgenbereich alle bestehenden und geplanten Speicherringquellen in Europa um ca. einen Faktor 10 übertreffen. Selbst im weltweiten Vergleich wird dies immer noch mindestens ein Faktor 2 gegenüber dem nächstbesten Konkurrenten, der APS-U (Argonne, USA), sein. Als weiteren Vorteil kann PETRA IV das hervorragende wissenschaftliche Umfeld des Science Campus Bahrenfeld mit einer Reihe von hochkarätigen Forschungszentren für sich verbuchen, deren Forschung sich eng an die Möglichkeiten an PETRA IV und den anderen Photonenquellen am Campus ausrichtet.

Die Optimierung von **BESSY III** als weltweit führende Anlage für die weiche Röntgenspektroskopie hebt sie von anderen Ausbauprojekten in Europa ab und erfüllt damit die im Rahmen von LEAPS angestrebte, strategisch relevante Spezialisierung. Durch die enge Kopplung von BESSY III an das Forschungsprogramm des HZB, den weiteren Ausbau der langfristigen Zusammenarbeit mit der PTB, der nationalen Metrologie-Einrichtung Deutschlands, sowie durch die Einbettung in den Wissenschafts- und Technologiepark Adlershof werden an BESSY III einzigartige Infrastrukturen für die Forschung mit Photonen entstehen, die als Teil breiter angelegter Forschungsprogramme weltweite Sichtbarkeit erlangen werden.

Die supraleitende Radiofrequenz-Elektronenbeschleunigung, die die Basis von **DALI** darstellt, gelangte primär in Deutschland in Anlagen wie FLASH, European XFEL und der aktuellen ELBE zur Reife. Diese Beschleunigertechnologie ermöglicht die Bereitstellung hochintensiver, gleichzeitig jedoch niederenergetischer und langwelliger Photonenpulse mit einzigartigen Charakteristika. Der Vorschlag DALI ist damit komplementär zu Kurzpuls-

Land	Name	Art	Status	Anmerkungen
Niederlande	FELIX	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• vier FELs</li> <li>• Parallelbetrieb von drei FELs möglich</li> <li>• größte MIR-THz-FEL-Nutzereinrichtung weltweit</li> <li>• normalleitend, kein CW-Betrieb</li> <li>• ein FEL mit extrem langen Wellenlängen (bis zu 1,500 <math>\mu\text{m}</math> <math>\equiv</math> 0.2 THz)</li> </ul>
Frankreich	CLIO	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• normalleitend, kein CW-Betrieb</li> </ul>
Russland	NovoFEL	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• normalleitend</li> <li>• CW bei MHz-Repetitionsraten</li> </ul>
China	CTFEL	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• supraleitend</li> <li>• CW bei MHz-Repetitionsraten (geplant)</li> <li>• beschränkt auf wenige THz (&lt;4 THz)</li> </ul>
China	Dalian Coherent Light Source	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• VUV-FEL, zusätzliche THz-Quelle geplant</li> <li>• normalleitend, kein CW-Betrieb</li> </ul>
Polen	PoIFEL	FEL	in Planung	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Anlage ähnlich zur bestehenden ELBE mit möglichem UV-FEL und superradianter THz-Quelle</li> </ul>
Türkei	TARLA	FEL	im Aufbau	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kopie von ELBE</li> <li>• CW-Betrieb geplant</li> </ul>
USA	LCLS-II	FEL	im Aufbau	<ul style="list-style-type: none"> <li>• harter Röntgen FEL mit zusätzlicher THz-Quelle</li> <li>• supraleitend, CW-Betrieb</li> </ul>
Deutschland	FHI-FEL	FEL	in Betrieb	<ul style="list-style-type: none"> <li>• keine Nutzeranlage</li> <li>• nur MIR</li> <li>• normalleitend, kein CW-Betrieb</li> </ul>
Deutschland	FLASH2020+	FEL	in Planung	<ul style="list-style-type: none"> <li>• XUV-FEL mit zusätzlicher THz-Quelle</li> <li>• supraleitend, kein CW-Betrieb</li> </ul>

Tabelle 6.3: Übersicht von international laufenden, geplanten und im Aufbau befindlichen THz-Quellen.

Röntgenstrahlungsquellen wie dem European XFEL geplant. Darüber hinaus wird die Kombination von CW-THz- und VUV-Strahlung sowie die Ankopplung an die Hochintensitätslaseranlagen DRACO und PENELOPE und das Hochfeld-Magnetlabor mit Feldpulsen bis 100 Tesla DALI zu einer weltweit einzigartigen Anlage machen.

**FLASH** ist einer von weltweit nur zwei XUV-Weiche-Röntgen-FELs, die von einem supraleitenden Linearbeschleuniger mit hohen Pulswiederholraten angetrieben werden. Durch die Kombination einzigartiger FEL-Strahleigenschaften bei sehr hohen Pulswiederholraten garantiert die Realisierung des Projekts FLASH2020+, eine weltweit führende Position der FLASH-Anlage in diesem Feld langfristig zu sichern.

Der **European XFEL**, der ebenso wie FLASH von einem supraleitenden Linearbeschleuniger angetrieben wird, erreicht weltweit die höchsten Photonenenergien, d.h. die kürzesten Wellenlängen, bei den gleichzeitig höchsten Pulsintensitäten. Damit ist der European XFEL insbesondere komplementär zu dem gerade den Betrieb aufnehmenden LCLS II in Kalifornien und bietet eine etwa 200-mal größere Pulswiederholrate als FELs, die auf einem normalleitenden Linearbeschleuniger beruhen.

## 7 Ausblick

Nach einer erfolgreichen Implementierung der hier vorgeschlagenen Strategie wird Deutschland auf dem Feld der beschleunigerbasierten Photonenquellen für mindestens die nächsten zwei Jahrzehnte technologisch hervorragend aufgestellt sein, um mittels der damit zur Verfügung stehenden Analytik einen signifikanten Beitrag zur Lösung heutiger und zukünftiger gesellschaftlicher Herausforderungen leisten zu können. Mit den sich daraus ergebenden Möglichkeiten werden, wie in Kapitel 4 beschrieben, Fragestellungen aus den Bereichen Lebenswissenschaften, Umwelt und Nachhaltigkeit, Energie, Mobilität, Informationstechnologie und Materialforschung angegangen werden können, die heute nicht oder nur eingeschränkt und mit sehr großem Aufwand bearbeitbar sind. Es ist zu erwarten, dass an diesen Anlagen, wie während der letzten Jahrzehnte, wissenschaftliche Durchbrüche und neuartige Erkenntnisse erlangt werden, insbesondere basierend auf dem erworbenen Verständnis neuer Materialien, ihrer Eigenschaften und den zugrundeliegenden Prozessen, sowie in den Lebenswissenschaften durch skalenübergreifende Einblicke in die Funktionalitäten dieser komplexen Systeme.

Davon werden akademische Nutzerinnen und Nutzer der Universitäten und außeruniversitären Forschungsorganisationen (Helmholtz, Leibniz, MPG) aus einem breiten Portfolio von Wissenschaftsfeldern, das sich von Physik, Chemie, Biologie, Materialwissenschaften, Erd- und Umweltwissenschaften bis hin zur Untersuchung von Kulturgütern erstreckt, ebenso wie industrielle Nutzerinnen und Nutzer profitieren. Die hervorragenden Experimentiermöglichkeiten der Anlagen werden dazu beitragen, die besten Köpfe in Deutschland zu halten und internationale Talente ins Land zu holen. Gleichzeitig bilden diese Anlagen eine herausragende Basis für die Ausbildung des wissenschaftlichen und technischen Nachwuchses.

Einhergehend mit dem Bau der Anlagen werden neue, innovative Technologien entwickelt. Dies geschieht in enger Abstimmung und Zusammenarbeit mit industriellen Partnern, mit denen auch die weitere Verwertung erfolgt. Da sich die Entwicklungen der Anlagen und der darin verwendeten, experimentellen Technologien während der Laufzeit kontinuierlich fortsetzen, werden diese Prozesse auch während der Betriebsphase fortgeführt. Damit tragen diese Anlagen direkt zur internationalen Wettbewerbsfähigkeit der deutschen Wirtschaft bei.

Zusätzlich eröffnet sich durch die vorgeschlagenen Maßnahmen die Möglichkeit, die Modelle für den Nutzerbetrieb derartiger Anlagen durch den Einsatz neuer Technologien grundsätzlich zu optimieren. Dies umfasst zum einen die Automatisierung der Experimente und den Einsatz vernetzter, virtueller Technologien, um den Durchsatz für standardisierte Messungen, wie beispielsweise in der Proteinkristallographie, maximal zu erhöhen, aber auch – gerade unter dem Eindruck einer globalen Pandemie wie COVID-19 – die Nutzung der Anlagen aus der Ferne für eine breite Nutzergemeinde zu ermöglichen.

Die neuen experimentellen Möglichkeiten an den hier vorgestellten Anlagen bringen aufgrund der schnelleren und umfangreicheren Erfassung aller Messdaten zum anderen auch neue Herausforderungen bezüglich der damit verbundenen Datenmengen und -raten mit sich. Die sich ergebenden Veränderungen zur Erfassung, Verarbeitung, Übertragung, Speicherung und Auswertung der Daten erfordern den Einsatz neuer Technologien, wie auf künstlicher Intelligenz basierende Algorithmen. Zusätzlich müssen andere Nutzungsmodelle etabliert werden, um mittels zertifizierter und akzeptierter Verfahren Rohdaten bereits während der Aufnahmen vorverarbeiten und in geeigneter Weise auf ein handhabbares Maß reduzieren zu können. Das bedeutet, die Betreiber müssen Einrichtungen und neue Prozesse schaffen, um den Nutzerinnen und Nutzern das Arbeiten in diesem Umfeld zu ermöglichen. Auch in diesem Kontext kann eine Stimulierung des Forschungs- und Wirtschaftsstandorts Deutschland durch die Entwicklung und den Betrieb dieser Anlagen erwartet werden.

Zusammenfassend kann man daher feststellen, dass die vorgeschlagenen Modernisierungsmaßnahmen PETRA IV,

BESSYIII und DALI sowie FLASH2020+ wesentlich dazu beitragen werden, die internationale wissenschaftliche Spitzenstellung Deutschlands zu sichern und somit die Basis dafür legen, dass die Anforderungen derzeitiger und zukünftiger High-Tech-Strategien erfüllt werden können.

# Glossar

APS	Advanced Photon Source, Argonne, USA
CAU Kiel	Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
CDR	Conceptual Design Report
CFEL	Centre for Free-Electron-Laser Science
CMWS	Center for Molecular Water Science
CRL	Compound Refractive Lens
CSSB	Center for Structural Systems Biology
CW	Continuous Wave (Dauerstrich)
CXNS	Center for X-ray and Nano-Science
DALI	Dresden Advanced Light Infrastructure
DBA	Double Bend Achromat
DPG	Deutsche Physikalische Gesellschaft
DRACO	DResden laser ACceleration sOurce
ELBE	Elektronen Linearbeschleuniger für Strahlen hoher Brillanz und niedriger Emittanz
EMBL	European Molecular Biology Laboratory
ESRF	European Synchrotron Radiation Facility
EUVL	Extreme Ultraviolet Lithography
FEL	Freie-Elektronen-Laser
FHI	Fritz-Haber-Institut
FZJ	Forschungszentrum Jülich
GeV	Gigaelektronenvolt
GMR	Giant Magnetoresistance
GPa – Mbar	Gigapascal – Megabar
HARBOR	Hamburg Advanced Research Centre for Bioorganic Chemistry
HZB	Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
HZDR	Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf
HZG	Helmholtz-Zentrum Geesthacht, jetzt Helmholtz-Zentrum Hereon GmbH
HZU	Helmholtz-Zentrum für Infektionsforschung, Braunschweig
KARA	Karlsruhe Research Accelerator
keV	Kiloelektronenvolt
KI	Künstliche Intelligenz
LCLS	Linear Coherent Light Source (SLAC, Stanford, USA)
LEAPS	League of European Accelerator-based Photon Sources
MBA	Multi-Bend-Achromat
MHz	Megahertz
MLS	Metrology Light Source (PTB)
PENELOPE	Petawatt ENergy-Efficient Laser for Optical Plasma Experiments
PTB	Physikalisch-Technische Bundesanstalt
SASE-FEL	Self Amplified Spontaneous Emission - Free Electron Laser
SR	Synchrotron Radiation
SRF gun	Superconducting Radio Frequency Photo Electron Injector (supraleitender Radiofrequenz-Photoelektroneninjektor)
TDR	Technical Design Report
TELBE	Terahertzquelle an ELBE
THz	Terahertz
TUHH	Technische Universität Hamburg
UHH	Universität Hamburg
VUV	Vakuum-Ultraviolett-Strahlung
XUV	Extrem ultraviolette Strahlung