

**Report on Austria's 2019 – 2023 Scientific Membership at the
Institute Max von Laue-Paul Langevin (ILL) neutron source**



ILL Beirat der ÖAW

- ◆ **Gerhard Krexner**, Universität Wien (chairman till June 2023)
- ◆ **Martin Fally**, Universität Wien (chairman since June 2023)
- ◆ **Hartmut Abele**, Technische Universität Wien (vice chair)
- ◆ **Ernst Bauer**, Technische Universität Wien
- ◆ **Silke Bühler-Paschen**, Technische Universität Wien
- ◆ **Klaudia Hradil**, Technische Universität Wien
- ◆ **Erwin Jericha**, Technische Universität Wien
- ◆ **Jürgen Klepp**, Universität Wien
- ◆ **Ronald Miletich**, Universität Wien
- ◆ **Oskar Paris**, Montanuniversität Leoben
- ◆ **Daniel Weselka**, Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung

Contributions by

- ◆ **Hartmut Abele**, Technische Universität Wien
- ◆ **Florian Aigner**, Technische Universität Wien
- ◆ **Katrin Bekes**, **Stefan Tangl**, Medizinische Universität Wien
- ◆ **Marco Deluca**, Materials Center Leoben
- ◆ **Martin Fally**, Universität Wien
- ◆ **Yuji Hasegawa**, Technische Universität Wien
- ◆ **Erwin Jericha**, Technische Universität Wien
- ◆ **Jürgen Klepp**, Universität Wien
- ◆ **Karin Kornmüller**, **Ruth Prassl**, Medizinische Universität Graz
- ◆ **Hartmut Lemmel**, Technische Universität Wien
- ◆ **Federico Mazza**, **Silke Bühler-Paschen**, Technische Universität Wien
- ◆ **Laura Mears**, **Markus Valtiner**, Technische Universität Wien
- ◆ **Ronald Miletich**, Universität Wien
- ◆ **Andreas Musilek**, Technische Universität Wien
- ◆ **Georg Pabst**, Universität Graz
- ◆ **Oskar Paris**, Montanuniversität Leoben
- ◆ **Irina Pradler**, Technische Universität Wien
- ◆ **Christian Prehal**, Universität Salzburg
- ◆ **Günther Redhammer**, Universität Salzburg
- ◆ **Erik Reimhult**, Universität für Bodenkultur
- ◆ **René Sedmik**, Technische Universität Wien
- ◆ **Stephan Sponar**, Technische Universität Wien
- ◆ **Anton Tamtögl**, Technische Universität Graz
- ◆ **Michael Zawisky**, Technische Universität Wien

Acknowledgements

- ◆ **Bernhard Plunger**
Austrian Academy of Sciences (ÖAW)
- ◆ **Daniel Weselka**
Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung (BMBWF)
- ◆ **Mark Johnson**¹
Institut Laue-Langevin (ILL)
- ◆ **Roland Resel**, **Klaudia Hradil**
Fachausschuss NESY, Österreichische Physikalische Gesellschaft (ÖPG)

1 Cover and back cover picture credits: courtesy of ILL

Inhaltsverzeichnis – Table of Contents

Zusammenfassung für Entscheidungsträger*innen.....	3
Die gesellschaftliche Relevanz der Arbeit mit Neutronen am ILL.....	4
Executive Summary	7
Societal impact of neutron science at the ILL.....	8
Preface of the ILL-director recognizing the Austrian associate membership.....	10
Statistics	11
Overview: Austrian ILL user community 2019-2023.....	11
Overview of neutron research@ILL by users with Austrian affiliation.....	12
Publications of users with Austrian affiliation and ILL: overview.....	13
Overview of scientific activities of users with Austrian affiliation @ILL.....	14
Selected scientific contributions	16
1 Biological, medical and soft matter science (life sciences).....	16
Biomaterials structures investigated using neutron scattering.....	16
Nanoskopische Struktur und Elastizität von Zellmembranen.....	19
Molekulare Biostrukturen – Plasma Lipoproteine.....	20
Bröselnde Kreidezähne.....	22
2 Materials science and condensed matter physics – novel materials.....	24
Nanoporöse Materialien für eine erfolgreiche Energiewende.....	24
Operando Neutronenstreuung an Post-Lithium-Ionen Batterien.....	26
Nanoscale structure and molecular motion at carbon materials & interfaces.....	28
Role of defects in the origin of relaxor behavior in barium titanate based ceramics.....	29
Angewandte Grenzflächenphysik.....	31
Inelastic neutron scattering to probe strongly correlated electronic and phononic matter.....	32
Magnetic soft matter.....	34
3 Foundations of Physics	35
Quantum Physics.....	35
Das S18: Neutroneninterferometer und USANS.....	36
Erstes Neutroneninterferometer aus getrennten Kristallen.....	37
Pfadbestimmung im Doppelspalt.....	37
Quanten Grinse Katze.....	38
Neutroneninterferometrie mit hoher Winkelauflösung.....	39
Effekte durch die Erdrotation und Gravitation.....	39
Optik mit sehr kalten Neutronen.....	40
Fundamental physics.....	42
Neutron β -decay and the weak coupling constants.....	43
Calibrated nuclear Recoils for Accurate Bolometry „CRAB“.....	44
Kalibrierung von CaWO_4 – Die hocheffiziente Neutrinodetektion durch Nucleus.....	45
Suche nach dunklen Kräften mit ultrakalten Neutronen.....	46
Decoherence-free entropic gravity: Model and experimental tests.....	47
4 Geowissenschaften	48
Neutron Crystallography of Mineral-Based Structures.....	48
TRIGA MARK-II REACTOR	49
Appendix: List of Q1-publications (high impact; ILL data base 2019 – 08/2023).....	51

Zusammenfassung für Entscheidungsträger*innen

Diese Broschüre, welche die Neutronenforschung von Nutzern an österreichischen Institutionen im Zeitraum von 2019 bis 2023 abbildet, stellt die Bedeutung der österreichischen Mitgliedschaft am **Institut Max von Laue - Paul Langevin (ILL)** dar. Österreich hat im Jahr 2020 seine 30-jährige Mitgliedschaft als *associate member* gefeiert. Der formale Vertragspartner ist dabei die Österreichische Akademie der Wissenschaften (ÖAW). Bis jetzt wurden diese Mitgliedsverträge jeweils auf fünf Jahre abgeschlossen und – aufgrund der gezeigten wissenschaftlichen Erfolge und der gesellschaftlichen Bedeutung – bereits sechsmal verlängert. Die jährlichen Kosten bewegten sich dabei zwischen 2.064 MEUR (bis 2018) und 2.575 MEUR (seit 2019), was zuletzt einem Anteil von 2.5% ² des Gesamtbudgets des ILL entsprach. Der deutliche Anstieg nach 2018 beruhte darauf, dass die österreichische Nutzergemeinschaft die vertragliche Strahlzeit regelmäßig überschritten hatte und das BMBWF auf diesen Umstand in sehr positiver Weise mit einer deutlichen Budgeterhöhung Rechnung reagiert hat, was von der österreichischen Neutronennutzergemeinschaft höchst wertgeschätzt wurde. Die aus dem finanziellen Beitrag abgeleitete und zur Verfügung gestellte Strahlzeit betrug ebenfalls 2.5% mit einem möglichen Überziehungsfaktor von 1.2, also max. 3% der Strahlzeit **ohne** erhöhte Kosten. Die finanziellen Beiträge werden dabei direkt vom Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft und Forschung (BMBWF) der ÖAW zugewiesen, welche sie gemäß Vertrag an das ILL-Konsortium weiterleitet.

Das **erklärte Ziel dieser Broschüre** ist es, die wissenschaftlichen Leistungen von Nutzern aus österreichischen Institutionen an den verschiedenen Einrichtungen des Neutronenforschungszentrums ILL während der letzten Vertragsperiode (seit 2019) aufzuzeigen und zusätzlich auch deren daraus resultierende **gesellschaftliche Relevanz zu erklären**. Damit soll eine Basis an Fakten und Argumenten gelegt werden, um die angestrebte Vertragsverlängerung um weitere sieben Jahre zu rechtfertigen und diese zu erleichtern.

Forschung wird einerseits **mit** sowie andererseits auch **an Neutronen** durchgeführt und ist ein hochaktuelles Gebiet der Naturwissenschaften. Aus der Ablenkung (Streuung) und einer eventuellen Änderung der Energie des Neutrons können Rückschlüsse auf die Struktur und Dynamik von kondensierter Materie gezogen werden. Ein wesentliches Kennzeichen von Neutronen besteht darin, dass sie sich in der Wechselwirkung mit Materie aufgrund der fehlenden Ladung ganz anders verhalten als die wesentlich bekanntere Röntgen- bzw. Synchrotronstrahlung. Aus der Kombination dieser Techniken lassen sich in der Folge komplementäre Informationen gewinnen. Im Gegensatz zur Synchrotronstrahlung können Neutronen die Eigenschaften von Materialien hinsichtlich ihrer Kerne sogar bei gleicher chemischer Zusammensetzung isotopenspezifisch abbilden und durch ihren Spin auch zusätzlich noch die magnetischen Eigenschaften. Die elektrische Neutralität erlaubt es ihnen, tief in Materie einzudringen und Volumeneigenschaften zu bestimmen. Bei Verwendung von Neutronen mit entsprechend niedrigen Energien wie sie am ILL bereitgestellt werden, also von thermischen bis zu (sehr) kalten Neutronen, kann zusätzlich zur Information über atomare (sub Nanometer) bis zu relativ großen Strukturen (Mikrometer, z.B. von biologischen Substanzen) auch noch jene über deren Dynamik gewonnen werden.

Die Suche nach exotischen und weitgehend unerforschten Entitäten wie dunkler Materie und dunkler Energie mittels Neutronenexperimenten profitiert nicht nur von der Ladungsneutralität, sondern auch von

² Lt. Vertrag ILL-478.7; 3.43% für das CENI-Konsortium, welches sich aus den Partnern Österreich (vertreten durch die ÖAW), Tschechische Republik (vertreten durch die Charles Univ. Prag) und Slowakei (vertreten durch die Comenius Univ. Bratislava) zusammensetzt.

der extrem kleinen Polarisierbarkeit des Neutrons. Dieser Vorteil gegenüber Experimenten mit den ebenfalls neutralen Atomen führt dazu, dass das Neutron bessere Ausschlussgrenzen hinsichtlich verschiedener Theorien, welche die Expansion des Universums beschreiben, setzen kann.

Das **Neutron** als Baustein der Materie ist aber auch **selbst Untersuchungsobjekt**. So dienen Experimente mit ultrakalten Neutronen dazu, fundamentale – bis jetzt nur theoretisch angenommene – Eigenschaften wie die erwähnte elektrische Neutralität oder die Abwesenheit eines elektrischen Dipolmoments zu überprüfen. Fragen nach der Lebensdauer des freien Neutrons, welche Informationen über fundamentale Wechselwirkungen beinhalten, die ihrerseits zentrale Relevanz für die Erklärung der Ursprünge des Universum haben, werden experimentell bearbeitet. Es können mit Neutronen noch zahlreiche weitere grundlegende quantenphysikalische Erkenntnisse, z.B. zur Gültigkeit der Formulierung der Heisenbergschen Unbestimmtheitsrelation, gewonnen werden. Komplexe Experimente konnten den Nachweis von gebundenen Quantenzuständen des Neutrons im Gravitationsfeld erbringen.

Die Diversität der Forschung mit und an Neutronen ist sehr breit, was auch die in diesem Bericht dokumentierten vielfältigen wissenschaftlichen Aktivitäten und Erkenntnisse der österreichischen Beiträge widerspiegeln.

Die Nutzung von Neutronen durch Forscher*innen reicht vom Gebiet der **Materialwissenschaften** (hard and soft matter), der **Technik** und der **Physik** über die **Umwelt** bis zu den **Biowissenschaften** und der **Medizin**. Die Erkundung grundlegender (quanten)physikalischer Fragestellungen mithilfe des Neutrons stellt ebenfalls, auch traditionellerweise, einen Schwerpunkt der österreichischen Wissenschaft dar. Es sei hier an die wegweisenden erstmaligen interferometrischen Experimente mit Neutronen durch die Gruppe um den Pionier der österreichischen Neutronenforschung, den langjährigen Direktor des Atom Instituts, *Helmut Rauch* erinnert, an denen neben anderen auch der Physiknobelpreisträger des Jahres 2022 *Anton Zeilinger* beteiligt war.

Die gesellschaftliche Relevanz der Arbeit mit Neutronen am ILL

Für Neutronenforschung gibt es *per se* keine kleinen Laboratorien, in denen man z.B. Testmessungen durchführen könnte – sie muss an Großforschungsanlagen (mit Kernreaktoren oder Spallationsquellen) durchgeführt werden. Von diesen ist das **ILL die derzeit weltweit stärkste und vielfältigste Quelle** und daher der **Zugang zum ILL entscheidend und unverzichtbar**. Gerade im Bereich Neutronenforschung hat Europa (mit insgesamt 17 Neutronenquellen) auch aufgrund des ILL noch vor den Vereinigten Staaten, Japan und Australien eine Vormachtstellung. Jährlich werden etwa 1900 Publikationen veröffentlicht³. Neutronenforschung trägt durch Innovation wesentlich dazu bei, die **großen gesellschaftlichen Herausforderungen** zu lösen: effiziente Energiespeicherung und Transformation zu erneuerbaren Energieformen (z.B. smarte Materialien für Batterien, Solarzellen, Supraleiter, elektrokatalytische Effekte), Umwelt (z.B. grüne Technologien, Detektion von Verschmutzung, Einfluss der Wolken bei der Erderwärmung), Gesundheit (z.B. Strukturinformation von degenerativen Erkrankungen, Erhöhung der Sensitivität von medizinischen Tests, Medikamentengabe und neue therapeutische Ansätze) und vieles mehr. Darüber hinaus verdient insbesondere die Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses in der Neutronenforschung eine besondere Erwähnung. Wenn auch die exakte Zahl von Qualifizierungsarbeiten im Lauf der Jahre nicht zu eruieren ist, so können doch untere Grenzen für die letzten 10 Jahre angegeben werden: mehr als zwanzig Doktorarbeiten, über dreißig Master- und Diplomarbeiten und drei Habilitationsarbeiten (eine davon wird demnächst abgeschlossen). Einige der Dissertationen wurden durch die Förderung von Jungwissenschaftler*innen aus dem ILL-Mitgliedsbeitrag erst ermöglicht. Exemplarisch sei

3 Quelle: European Neutron Scattering Association, <http://www.neutrons-ensa.eu>, 2017

auch auf die Exzellenz der Abschlüsse hingewiesen: so erhielt z.B. Richard Wagner für seine Dissertation „*Quantum Causality and Macrealism Studied With the Neutron Interferometer*“ einen Staatspreis (award of excellence).

Die in dieser Broschüre dokumentierten Beiträge von österreichischen Forschungsgruppen sind extrem breit aufgestellt, es wurden in den letzten 5 Jahren **33** der insgesamt über 40 Instrumente⁴ genutzt. Die Fragestellungen können in drei große Themenblöcke gegliedert werden:

- (1) Biologie, Medizin, und soft matter (life sciences)
- (2) Neue Materialien (material sciences and condensed matter physics)
- (3) Fundamentale physikalische Fragestellungen (fundamental quantum physics)

ad (1): hier werden mit Neutronen gesellschaftlich aktuell relevante Forschungen vorangetrieben. Beispiele dafür sind: die Aufklärung der Struktur des SARS-CoV-2 Virus, Beiträge zur Entwicklung neuer Medikamente in der Lipoproteinforschung, zur Freigabe von Wirkstoffen, der biomedizinischen Bildgebung oder den Ursachen für das gehäufte Auftreten einer speziellen Strukturstörung aus der Kinderzahnheilkunde, das Phänomen der Molaren-Inzisiven-Hypomineralisation.

ad (2): die künftige Gesellschaft wird sehr viel stärker darauf angewiesen sein, sich an rasche Änderungen der Umwelt anpassen zu können. Ein zentraler Baustein dafür ist die Entwicklung neuer Materialien, um diese Transformation ebenfalls rapide durchzuführen. Neutronenstreuung wird hier von österreichischen Gruppen genutzt, um z.B. die Dynamik und Struktur von Atomen und Molekülen auf Oberflächen sowie in Nanomaterialien zu messen, ein Verständnis für die Mechanismen zu erlangen, reversibel molekularen Schwefel in Lithium Sulfid zu konvertieren, das benötigt wird, um Hochleistungs-Batterien mit wasserfreien Elektrolytlösungen herstellen zu können. Neutronenstreuung ist weiters nötig, um wesentliche Erkenntnisse für den Einsatz von Keramik-Kondensatoren mit hoher Energiedichte zu gewinnen, nanoporöse Materialien für eine erfolgreiche Energiewende herzustellen, Grenzflächenphysik zu betreiben oder starke Korrelationen zwischen Elektronen aber auch in rein phononischen Systemen kondensierter Materie zu untersuchen. Manchmal wird auch der Spin des Neutrons spezifisch ausgenutzt, um etwas über Eigenschaften von magnetoaktiven Materialien oder Ferrofluiden auf der Nanoskala zu lernen. Diese Themen finden sich unter den **Schwerpunktsfragen** zu Forschung und Innovation der **Europäischen Kommission** (“Frontier research”) und werden teilweise durch Exzellenzprojekte (**ERC grants** von S. Freunberger, C. Prehal, M. Deluca) gefördert.

ad (3): fundamentale physikalische Fragestellungen tragen wesentlich dazu bei, das Verständnis der Welt in ihren kleinsten Dimensionen zu erweitern. In diesem Größenordnungsbereich zeigen sich die quantenphysikalischen Eigenschaften direkt. Wie bereits erwähnt, hat die österreichische Forschungslandschaft hier in den letzten Jahrzehnten zentrale Beiträge geleistet, insbesondere durch die Herstellung von Neutroneninterferometern und anschließende Untersuchungen mit diesen. Fragen zur Heisenbergschen Unsicherheitsrelation, sogenannten “schwachen” Messungen, dem Einfluss der Gravitation im Quantenbereich oder dem Wesen von dunkler Materie und dunkler Energie können mithilfe von Neutronenexperimenten untersucht und möglicherweise geklärt werden. Solche Experimente sind de facto nur an einer derart leistungsstarken Quelle wie dem ILL möglich, da sie sehr kalte bzw. ultrakalte Neutronen bereitstellt.

Weitere sehr spezialisierte Fragestellungen von österreichischen Nutzern betreffen geowissenschaftliche Themen (Univ. Wien, Univ. Salzburg), sind kernphysikalischer Natur (Univ. Wien und IAEA) bzw. stark

⁴ Quelle: <https://www.ill.eu/users/instruments>

anwendungs-orientierte Prozesse (Lenzing, NEMAK). Die Verfügbarkeit von thermischen Neutronen am TRIGA Reaktor (Techn. Univ. Wien) trägt dazu bei, Experimente in Wien vorbereiten zu können, die dann am ILL konzipiert durchgeführt werden können. Zusätzlich spielt der TRIGA Reaktor eine wesentliche Rolle, Studierenden diejenigen experimentellen Techniken der Neutronenstreuung zu vermitteln, welche eine wesentliche Voraussetzung für Arbeiten am ILL darstellen. Daher findet sich am Ende der Broschüre auch eine Darstellung der Leistungsmerkmale des TRIGA Reaktors.

Die Leistungen und Ergebnisse der Wissenschaftler*innen von österreichischen Institutionen auf dem Gebiet der Neutronenforschung am ILL sind durch eine Reihe von Parametern eindrucksvoll nachgewiesen: die Anzahl und Qualität der Publikationen (4% der ILL Publikationen bei nur 2.6% Strahlzeit, siehe die Abbildung auf Seite 13 und die Liste der Q1-Publikationen ab Seite 50), der ILL Highlights, der Strahlzeituerkennung (sehr hoch). Wesentlich zu erwähnen ist auch, dass der Zugang zum ILL durch österreichische Nutzer auch für die Exzellenzprogramme der Europäischen Kommission (**ERC grants** von M. Deluca und C. Prehal) zentral ist. Die Ausbildung von zahlreichen Jungwissenschaftler*innen auf dem Gebiet der Neutronenstreuung im Rahmen von universitären Abschlussarbeiten (Masterarbeiten und Dissertationen) stellt neben der Qualifizierung für diese auch einen wesentlichen gesellschaftlichen Mehrwert da.

Executive Summary

This booklet, which summarizes neutron research of users at Austrian institutions from 2019 to 2023, is intended to highlight the importance of Austria's membership at the Institut Max von Laue - Paul Langevin (ILL). Austria celebrated its 30-year membership as an associate member in 2020. The formal contracting partner is the Austrian Academy of Sciences (ÖAW). So far, these membership contracts have been concluded for five years and have already been renewed six times - also due to the scientific successes achieved and their importance for society. The annual costs ranged between 2.064 MEUR (until 2018) and 2.575 MEUR (since 2019) which corresponded to a share of 2.5% ⁵ of the ILL total budget. The significant increase of budget after 2018 was due to the fact that the Austrian user community regularly exceeded the contractual beam time and the BMBWF responded to this in a very positive way with a considerable budget increase, which was highly appreciated by the Austrian neutron user community. The allocated beamtime derived from this percentage consequently was 2.5% allowing for an overuse by a factor of 1.2, i.e. of up to max. 3% of the beamtime **without additional costs**. The financial contributions are directly allocated by the Austrian Federal Ministry of Education, Science and Research (BMBWF) to the ÖAW, which passes them on to the ILL consortium according to the contract.

The declared **aim of this booklet** is to present the scientific achievements of users from Austrian institutions at the various beamlines of the Neutron Research Center ILL during the last contract period (since 2019) and additionally to **explain** their resulting **societal relevance**. This should provide a basis of facts and arguments to justify the desired extension of the contract for another seven years and to support it.

Research is carried out **with neutrons** on the one hand and on the other hand also **on neutrons**. From the deflection of neutrons (scattering) and a possible change in their energy, conclusions can be drawn about the structure of matter and ongoing dynamics. Consequently the neutron and its properties are an emerging field of natural sciences. An essential characteristic of neutrons is that due to the lack of charge they behave quite differently in their interaction with matter than the much better known X-rays or synchrotron radiation. From this, complementary information can be and actually is obtained. Neutrons are able to reveal the properties of materials with respect to their nuclei (isotopes) rather than their electrons characteristic for the type of atom and thus the chemical composition. Furthermore, they characterize materials with respect to their magnetic properties due to the neutron spin. The electrical neutrality allows neutrons to penetrate deep into matter and to determine bulk properties. For neutrons with correspondingly low energies as provided at the ILL, i.e. from thermal to (very) cold neutrons, information about atomic (sub-nanometer) to relatively large structures (micrometer, e.g. of biological substances) can be gained together with knowledge about their dynamics.

The search for exotic and hitherto largely unexplored entities such as dark matter and dark energy by means of neutron experiments benefits not only from the neutrality of the neutron but also from the extremely small polarizability of the neutron. This advantage over the likewise neutral atoms paves the way for the neutron to set better experimental exclusion limits on different theories, which describe the expansion of the universe.

However, as stated above the **neutron** as a building block of matter is also itself an **object of investigation**. Experiments using ultracold neutrons allow to probe fundamental theoretically predicted properties such as

5 According to contract ILL-478.7; 3.43% for the CENI-consortia. The latter is constituted by the following partners: Austria (represented by the Austrian Academy of Sciences), the Czech Republic (represented by Charles University Prague) and Slovak Republic (represented by Comenius University Bratislava).

the already mentioned electric neutrality or the absence of an electric dipole moment of the neutron. The precise lifetime of a neutron, relevant for the question how the infant universe evolved, can be measured. Fundamental quantum science puzzles are being tackled using neutrons, e.g., the validity of the standard formulation of the Heisenberg uncertainty principle. Highly complex experiments demonstrated the bound quantum states of the neutron in a gravitational field.

Science with and on neutrons is extremely diverse – a fact that is manifested in this booklet by summarizing in particular the Austrian contributions to this topical field.

Neutrons are universal probes that help scientists to gain knowledge in **materials science** (hard and soft matter), **technology**, **physics**, **environmental** and **bioscience**, last not least **medical research**. There is a long lasting Austrian tradition to elucidate foundations of quantum physics employing neutrons, a focus which originates in the seminal interferometric experiments by the group around *Helmut Rauch* in the early seventies. The 2022 physics Nobel laureate *Anton Zeilinger* was member of this group which then contributed spectacular insights.

Societal impact of neutron science at the ILL

There aren't any small labs for neutron science *per se* to make test measurements with neutrons because of lacking efficient table-top neutron sources. Neutron research thus has to be done at large scale facilities employing nuclear reactors or spallation sources. Among these the **ILL is the worldwide leading facility providing the highest flux together with the largest number and diversity of top-level instruments**. Therefore, the **access** to this source and the experimental facilities is **decisive and essential**. Neutron research is one of the fewer fields for which Europe (where 17 neutron sources are located) still has the leading position - owing not least to the ILL – leaving behind the US, Japan and Australia. About 1900 publications are published each year⁶. Neutron research paves the way for innovation and essentially contributes to addressing and solving the **grand societal challenges** such as: efficient energy storage and the transformation towards sustainable energy (e.g., smart materials for batteries, solar cells, superconductors, electrocaloric effects), environment (e.g. green technologies, detection and fight of pollution, influence of clouds on global warming), health (e.g. structural information on degenerative diseases, increasing the sensitivity of medical tests, drug delivery and new therapeutical approaches). Furthermore, the training of young scientists in neutron research deserves a special mention. Even if the exact number of qualifying theses over the years cannot be determined, lower limits can be given for the last 10 years: more than twenty PhD theses, more than 30 Master and Diploma theses, and three "*Habilitation*" theses (one of them is still ongoing). Some of the PhD theses were made possible by the support of young scientists from the ILL membership fee. The excellence of the theses is also worth mentioning: e.g. was Richard Wagner recipient of an award of excellence for his dissertation "*Quantum Causality and Macrorealism Studied With the Neutron Interferometer*" (2021).

Scientists at Austrian institutions contributed to the above mentioned challenges using neutrons in very different, diverse ways which is mapped by the fact that during the last 5 years **33** out of 40 instruments⁷ were used to answer scientific questions. The latter can roughly be grouped into:

- (1) Biology, medicine, and soft matter (life sciences)
- (2) Novel materials (materials science and condensed matter research)
- (3) Foundations of physics (quantum physics)

⁶ Source: European Neutron Scattering Association, <http://www.neutrons-ensa.eu>, 2017

⁷ Source: <https://www.ill.eu/users/instruments>

ad (1): neutrons are used to promote societal relevant research. Examples are: structure refinement of the SARS-CoV-2 virus, contributions to develop new drugs in lipoprotein research, revealing the importance of nanoparticles for drug delivery, biomedical imaging or to find the reasons for heaped up Molar Incisor Hypomineralization, a frequent dental condition of young patients that presents major challenges for dental professionals in practice and research.

ad (2): future society will be much more dependent on being able to adapt to rapid changes in the environment. A central building block for this is the development of new materials to carry out this transformation also rapidly. Neutron scattering is used here by groups from Austrian institutions, e.g. to measure the dynamics and structure of atoms and molecules on surfaces as well as in nanomaterials, to gain an understanding of the mechanisms to reversibly convert molecular sulfur into lithium sulfides, which is needed to make high-performance batteries with water-free electrolyte solutions. Neutron scattering is further needed to design essential insights for the use of ceramic capacitors with high energy density, to produce nanoporous materials for a successful energy transition, to do physics of interfaces or to study strong correlations between electrons but also in purely phononic systems of condensed matter. Sometimes the spin of the neutron is also specifically exploited to learn about properties of magnetoactive materials or ferrofluids at the nanoscale. These scientific topics are among the **dedicated fields of research** and innovation of the **European Commission** ("Frontier research") and are partially funded by excellence grants (**ERC grants** C. Prehal, S. Freunberger, M. Deluca).

ad (3): fundamental problems in physics contribute essentially to explore and understand our world based on (sub)atomic dimensions ("at the bottom" as it was called by R. Feynman). At these dimensions quantum physics properties are directly revealed. During the last decades scientists from Austrian institutions made essential contributions, which originated from the setup of the already mentioned thermal neutron interferometers and subsequent investigations employing these instruments. The Heisenberg uncertainty relation, so called "weak measurements", the influence of gravitation in the quantum regime or the essence of dark matter and energy can be investigated by performing neutron experiments. **For all these fundamental problems and its solutions the high-power neutron source at ILL is indispensable.** Access to cold, very cold and ultracold neutrons allows to investigate and eventually solve some of these fundamental questions.

Other specialized questions of Austrian users concern geoscientific topics (University of Vienna, University of Salzburg), are of nuclear physics nature (University of Vienna and IAEA) or are strongly application-oriented processes (Lenzing, NEMAK). The availability of thermal neutrons at the TRIGA reactor (Techn. University of Vienna) is an essential prerequisite to allow the preparation of experiments in Vienna which are then (time) efficiently and concisely conducted at the ILL. Therefore, the booklet is concluded by a short summary of the TRIGA reactor at Vienna and its performance.

The achievements and results of scientists from Austrian institutions in the field of neutron research at ILL are impressively demonstrated by the following parameters: the number and quality of publications (4% of ILL publications with only 2.6% beam time, see table on page 13 and the list of Q1-publications starting on page 50), ILL highlights, beam time attribution (very high). It is also essential to mention that access to ILL by Austrian users is also central for the excellence programs of the European Commission (**ERC grants** of M. Deluca and C. Prehal). The training of numerous young scientists in the field of neutron scattering in the context of university theses (master's theses and dissertations) represents, in addition to the qualification for them, also a significant added value for society.

Preface of the ILL-director recognizing the Austrian associate membership

Austria – a major partner at the ILL for 33 years.

Austria, along with Spain and Switzerland, is one of the three, longest-standing Scientific Members at ILL and thirty years of our successful scientific partnership were celebrated in a memorable event at the Academy of Sciences in Vienna in June 2022.

Over more than three decades the Austrian community has developed its prowess in particle and quantum physics research with neutrons. The importance of this work was recognized when Professor Anton Zeilinger, from Vienna, and colleagues were awarded the Nobel Prize in Physics in 2022 for their research on quantum entanglement, Professor Zeilinger having spent half of his career studying the quantum properties of neutrons at ILL.

Over three decades, the Austrian community has also renewed and diversified to take full advantage of neutrons as a unique analytical probe of atoms and molecules in matter. Diversification is driven by the maturity of neutrons as a research technique that has progressively opened to a wider scientific community needing multidisciplinary techniques to tackle ever more complex research challenges. The research community has evolved from a core of expert users to include a larger number of more occasional users. Key indicators reflect this trend: over the last five years, just over 100 individual researchers from Austria requested beam time at ILL on almost all of the 40 public instruments.

The ILL instrument most used by Austrian scientists is the small angle scattering instrument D22. One publication from D22 in 2021, involving scientist (Harald Pichler) from Graz, is particularly worth noting. The international team, including Astra Zeneca, used contrast variation uniquely possible with neutrons to obtain exquisite information on the release mechanism of messenger-RNA from carrier, lipid nanoparticles. The relevance and impact of this kind of research is obvious in the light of the global health challenge posed by Covid-19, as has just been recognized by the award of the 2023 Nobel Prize in Medicine for the development of m-RNA vaccine technology.

ILL is now completing two decades of major investment at a cost of 200 MEUR with the final delivery of the Endurance programme in 2024. Along with the early signature of the Sixth Protocol by the Associates to fund ILL until the end of 2033, this sets the scene for a decade of cutting-edge research at ILL to deliver knowledge and address major societal challenges. We look forward to an exciting decade ahead, in particular with our international partners, with Austria being one of the most important.

Statistics

Overview: Austrian ILL user community 2019-2023

Wien	▶ Technische Universität Wien ▶ Universität Wien ▶ Universität für Bodenkultur ▶ Medizinische Universität Wien ▶ Austrian Institute of Technology (AIT) ▶ International Atomic Energy Agency (IAEA)
Graz	▶ Technische Universität Graz ▶ Universität Graz ▶ Medizinische Universität Graz
Leoben	▶ Montanuniversität Leoben ▶ Materials Center Leoben GmbH
Linz	▶ NEMAK Linz GmbH
Salzburg	▶ Universität Salzburg
Tulln/Donau	▶ Universität für Bodenkultur
Lenzing	▶ Lenzing AG
Klosterneuburg	▶ Institute of Science and Technology Austria (ISTA)

Table 1: The Austrian user community at the ILL (2019-2023). **15 institutions** from **8 locations**



Figure 1: Locations of institutions with Austrian ILL users. Within the last 5 years, 33 out of 47 instruments were used by Austrian scientists.

Overview of neutron research@ILL by users with Austrian affiliation

- **>100 scientists** (unique users) with Austrian affiliation from
- **15 institutions** were applying by submitting
- **146 proposals, i.e. 29 per year** (on average), among them
- **87 accepted proposals, 17 per year** (i.e. experiments) at
- **33 different instruments**, topically in each of the 9+ colleges.

College	Topic	Proposals	Accepted ⁸
1	Applied Metallurgy, Instrumentation and Techniques	15	10
3	Nuclear and Particle Physics	42	32
4	Magnetic Excitations	9	3
5	A) Crystallography B) Magnetic Structures	10	5
6	Structure and Dynamics of Liquids and Glasses	8	4
7	Spectroscopy in Solid State Physics and Chemistry	22	14
8	Structure and Dynamics of Biological Systems	16	5
9	Structure and Dynamics of Soft Condensed Matter	24	14
Extra	Others : EASY, Deuteration Lab, PANEDM	9	9
Total		146	87

Table 2: Number of proposals and their acceptance for different colleges of Austrian applications for beamtime ²

Table 2 highlights the diversity of the Austrian users' scientific fields impressively: proposals for each and every of the topical colleges were submitted to request beamtime. It is noticeable that the focus of the current users trends from formerly purely physics to more and more biological/medical and soft matter. This shows that the relevance of neutron scattering techniques to other areas such as life sciences is now accepted by their communities. This is a promising evolution and demonstrates that even while *in-house-facilities* for local training and education for neutron scattering are absent, scientists from other branches than physics utilize the specific advantages of neutrons for unraveling their scientific problems.

Beam time requests are performed mostly for the following groups of instruments:

1. the very and ultra cold neutron ports at the PF2: UCN, VCN, EDM, TES (22 %)
2. the small angle neutron scattering instruments (D11, D22, D33) employing cold neutrons (~20 %)
3. and the three axis spectrometers for inelastic scattering with thermal neutrons (~18%)
4. the CRG (TU Wien) instrument S18 where the thermal neutron interferometer and the ultra small angle diffraction setups are run (~11 %)

Instrument	% of all accepted proposals	Beamtime (weighted) ¹⁰
1) PF2 (UCN, VCN, EDM, TES)	22%	61% (28%)
2) Inelastic scattering (INnm)	18%	12% (22%)
3) S18 (CRG, TU Wien)	11%	10% (18%)
4) PF1b	2%	7% (12%)
5) SANS (D11, D22, D33)	20%	3% (5%)

Table 3: the five instrument groups with highest beamtime-use

⁸ recommended by the Sub-Committee and accepted by the ILL Management after national balancing

⁹ source: ILL database 04/ 2018-04/2023

¹⁰ PF2 consists of five (now: four) ports and the beamtime is normalized in official statistics

Naturally, the requested and allocated beamtime strongly depends on the available time (number of cycles, their power and duration), the number of delivered neutrons, the overbooking rate and first of all the quality of the proposals. As the number of delivered neutrons strongly decreases with increasing wavelength, the cold, and in particular the very cold and ultracold neutron ports typically request and receive much more of the beamtime. In addition the PF2 has four ports so that beamtimes are to be weighed. In total **2170 days** of beamtime were requested by scientists from Austrian institutions, **1366 days** of beamtime were allocated.

The conducted experiments are diverse not only in the sense of employing not less than 37 different instruments but also in their intention: while most of the experiments (e.g. at S18, PF2) are dedicated to exploring the **fundamental** understanding of **physics** (quantum phenomena, Heisenberg uncertainty relation, properties of the free neutron, e.g., charge or electric dipole moment) on the other end of experiments are **applied sciences** (periodic disorder of cellulose fibres, residual stress in aluminum alloy cylinders). Life sciences, such as biology and medicine become increasingly important which is reflected in the ever growing number of applications for beamtime at the SANS beamlines.

Publications of users with Austrian affiliation and ILL: overview

- ◆ More than **400 publications** since 1999 (about 140 publications 2019-08/2023)
- ◆ **24 publications/year** on the average for the last contract period
- ◆ **68 Q1-publications**, **3 ILL highlights** and a number of further distinctions¹¹

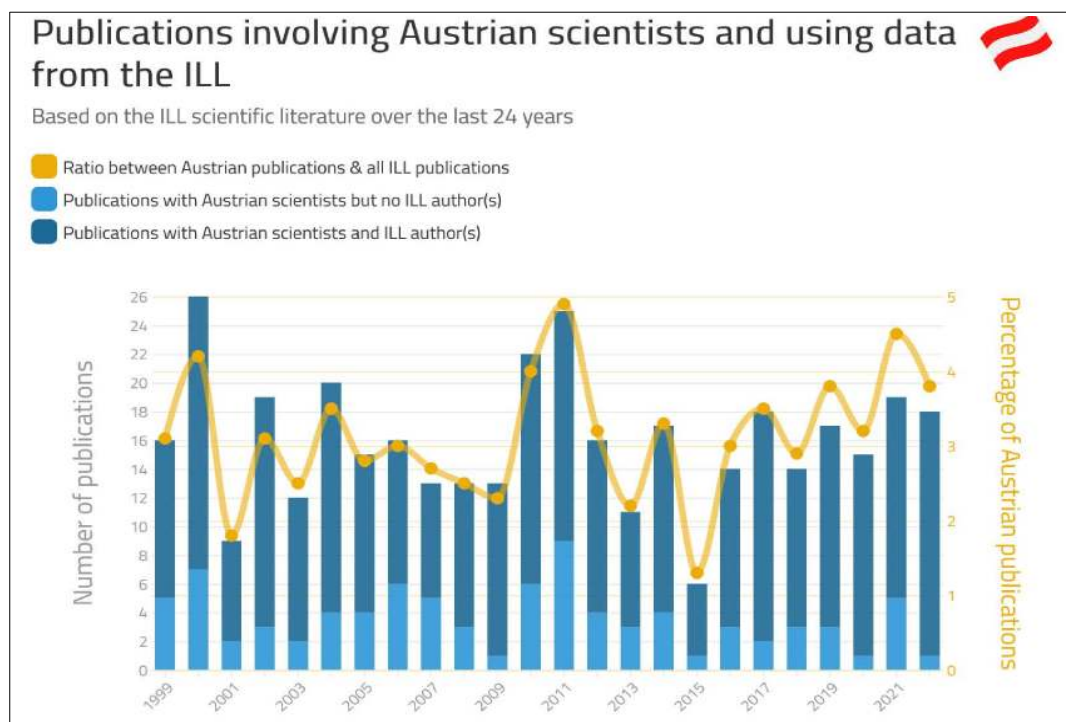


Figure 1: Number of publications with Austrian scientists and percentage of Austrian publications (1999-2022). Source: ILL Database. Average percentage of 4% when using beamtime of only 2.6%.

A list of all Q1-publications in 2019-08/2023 is provided at the end of the booklet.

¹¹ Q1 indicates the first quartile within a certain subject, e.g. „Condensed Matter Physics“, „Nuclear and High Energy Physics“, „General Physics and Astronomy“ etc. as ranked by the Scopus Source database (run by Elsevier). This is a measure of quality/success used also in „Leistungsvereinbarungen“ between BMBWF and universities.

Overview of scientific activities of users with Austrian affiliation @ILL

This section starts with selected highlights of research and then showcases typical, selected contributions of recent scientific advances using neutron scattering. The [first paragraph in German language](#) offers a general introduction, an overview on the addressed scientific topics and explains why the **ILL is important** for conducting this work. The list of related publications by scientists with **Austrian affiliation** are marked in **bold**.

Selected ILL highlights with Austrian contributions

Out of the large number of experiments performed at the ILL, **selected highlights** are defined and presented on their webpage. These are recent highlights with Austrian contribution:

☑ **The Quantum Cheshire Cat:**

First experimental observation of a 'Quantum Cheshire Cat' could help to perform high precision measurements of quantum systems.

Researchers from the Vienna University of Technology have performed the first separation of a particle from one of its properties. The study, carried out at the Institute Laue-Langevin (ILL) and published in Nature Communication, showed that in an interferometer a neutron's magnetic moment could be measured independently of the neutron itself, thereby marking the first experimental observation of a new quantum paradox known as the 'Cheshire Cat'. The new technique, which can be applied to any property of any quantum object, could be used to remove disturbance and improve the resolution of high precision measurements (S18, Hasegawa group)

<https://www.ill.eu/news-press-events/press-corner/press-releases/scientists-separate-a-particle-from-its-properties>

☑ **A Quantum Wave in Two Crystals:**

a team from TU Vienna, INRIM Turin and ILL Grenoble has succeeded for the first time in building a neutron interferometer from two separate crystals.

Particles can move as waves along different paths at the same time – this is one of the most important findings of quantum physics. A particularly impressive example is the neutron interferometer: neutrons are fired at a crystal, the neutron wave is split into two portions, which are then superimposed on each other again. Characteristic interference pattern can be observed which prove the wave properties of matter. (S18, Abele group)

<https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/a-quantum-wave-in-two-crystals>

☑ **Accurate measurement of the weak axial vector coupling constant:**

The experiment was performed and analyzed in a collaboration of scientists from Heidelberg University, the ILL, and the Technical Universities of Munich and Vienna.

In particle physics, g_A is needed together with the neutron lifetime to calculate the element V_{ud} of the CKM quark mixing matrix. With the new result, the accuracy of V_{ud} from neutron data approaches that from nuclear decays where the latter require specific nuclear corrections. The unitarity of the CKM matrix is very sensitive to new physics beyond the standard model of particle physics. Its test provides constraints that currently cannot be obtained from other precision tests and collider experiments. Furthermore, the new result has already been used to exclude exotic (dark) decays as explanation for the so-called neutron lifetime anomaly.

But g_A is also an important input in other fields: It is needed to calculate the rate of the primary reaction of the proton-proton chain in the sun and the solar neutrino flux, the abundance of light elements after primordial nucleosynthesis, the formation of neutron stars, or the efficiency of neutrino detectors. (PF1,

Abele group)

<https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/accurate-measurement-of-the-weak-axial-vector-coupling-constant>

☑ **No dark side to neutron decay:**

The experiment was performed and analysed in a collaboration of scientists from the University of Heidelberg, the ILL, the Technical University of Munich and the Technical University of Wien.

Last year, scientists became rather excited when they thought they might have found evidence for the production of dark matter particles from experiments measuring the lifetime of the neutron. In 2018, theorists suggested that the difference might be because the beam experiments measured only beta decay, whereas the bottle measurements picked up all decay modes, thus shortening the measured lifetime. They proposed that there might be extra decay channels into dark-matter particles in play to account for the difference. Precise measurements at the ILL of beta asymmetry rule out neutron decay into exotic dark matter particles. (PF1, Abele group)

<https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/no-dark-side-to-neutron-decay>

☑ **High hydrostatic pressure specifically affects molecular dynamics and the shape of low-density lipoprotein particles:**

Lipid composition of human low-density lipoprotein (LDL) and its physicochemical characteristics are relevant for proper functioning of lipid transport in blood circulation. The interaction of the proteins forming the surface of lipoproteins determines whether triglycerides and cholesterol will be added to or removed from the lipoprotein transport particles. According to these two functionalities, the common use is to distinguish between “bad” and “good” cholesterol when designating LDL and high density lipoproteins (HDL) although both are essential in certain quantities for the correct functioning. (IN5, Prassl group)

<https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/high-hydrostatic-pressure-specifically-affects-molecular-dynamics-and-the-shape-of-low-density-lipoprotein-particles>

Further highlights are scientific results that were chosen as a cover page of a journal, e.g. J. Phys. Chem. Lett. **12** (2021) (Prassl/Kornmüller, Medical University of Graz), recognitions as an influential contribution to the particular field, e.g. the paper by Lemmel et al. in J. Appl. Cryst. on the occasion of 75th anniversary of the Int. Union of Crystallography or publications in highest ranked journals (Nature, Science, Phys. Rev. Lett.), see list at the end of the booklet.

A final remark on the **COVID pandemic**: of course, the latter influenced and modified the usual way of scientific activities dramatically as it changed any other aspect of our lives. Due to travel restrictions (Austria-France) and measures adopted by governments the on-site experiments at the ILL were a challenging task which partially hindered ongoing work. However, as a potential benefit of the situation we also experienced a fast progress in remote control access to instruments which will prevail and also be useful to a certain extent in future. Moreover, some of us took an active role and contributed to exploring the SARS-Cov2 virus itself employing neutron experiments!

Selected scientific contributions

1 Biological, medical and soft matter science (life sciences)

Biomaterials structures investigated using neutron scattering

Zusammenfassung der Aktivitäten

Neuartige Biomaterialien verwenden Polymere und biomolekulare Anordnungen nach dem Vorbild der Natur, um mit dem Körper kompatibel zu sein. Nicht nur die Klasse des organischen Materials, z. B. Polymere oder Lipide, ist wichtig. Die Strukturen, die Polymere in Wasser auf der Nanoskala bilden, sind entscheidend dafür, wie ein Biomaterial seine Funktion in einer biologischen Umgebung erfüllt. Auch die Anordnungen, die die Biomoleküle bilden, und die Art und Weise, wie sie sich in der Umgebung verändern, machen solche Materialien einzigartig. Nur die Neutronenstreuung kann uns dabei helfen, solche Strukturen zu charakterisieren und Materialien für die Freigabe von Wirkstoffen, die biomedizinische Bildgebung und Wundverbände zu verbessern.

Selected scientific examples (Reimhult group, Univ. für Bodenkultur)

Interfaces of drug delivery and medical imaging nanoparticles

Nanoparticles are increasingly used in drug delivery and medical imaging. The recent success of the COVID vaccines was as much a success of the highly engineered nanoparticle delivery system as it was of mRNA, and the BOKU spin-off Polymun played an essential part in this effort. There is a link between fundamental university research and such successes in Austria. We have used neutron scattering at ILL as an essential tool to investigate polymer structures on nanoparticles that can be used for drug delivery or medical imaging (Fig. 1). Our research has shown that unique designs of polymer structures can completely suppress interactions with blood proteins [1], which is a prerequisite for evading the body's defense against all foreign substances, including drugs meant to help. We could only hypothesize how the protective polymer shell achieved this feat, the theory is inadequate and got beamtime at ILL to investigate this. Our work at ILL also included substantial investigations of how so-called smart polymer biointerfaces that change their interactions with biological molecules with temperature do so [2] and natural molecule coatings to reduce biomedical nanoparticle toxicity [3]. The majority of this work is still to be published but would not exist without the ILL.

Biomaterial structures investigated using neutron scattering

We coordinate a large European network on the topic of smart wound dressings, which can promote wound healing and diagnose and treat bacterial infections with minimal intervention and risk. Modern burn wound dressings protect and hydrate the wound. Advanced natural biopolymers could perform these functions as well as add new smart functions, such as being antimicrobial or drug-releasing, in contrast to common cellulose-based wound dressings. Promising materials to keep wounds moist and protected against infection during the larger part of the healing process are hydrogel wound dressings. We have used ILL to investigate both how spider silk proteins assemble into the micellar and fibrous structures that can be used and how functional nanoparticles influence and integrate into these assemblies. In similar studies, we have studied how the polymer semiconductor and photosensitizer can be incorporated in micellar hydrogels for, e.g., light-controlled functional wound dressings (Fig. 2). While we can complement such studies of structure using high-end cryo-electron microscopy methods, only neutron scattering makes it possible for us to verify

the statistical relevance of what we observe in imaging and to follow how the structures change with time [4].

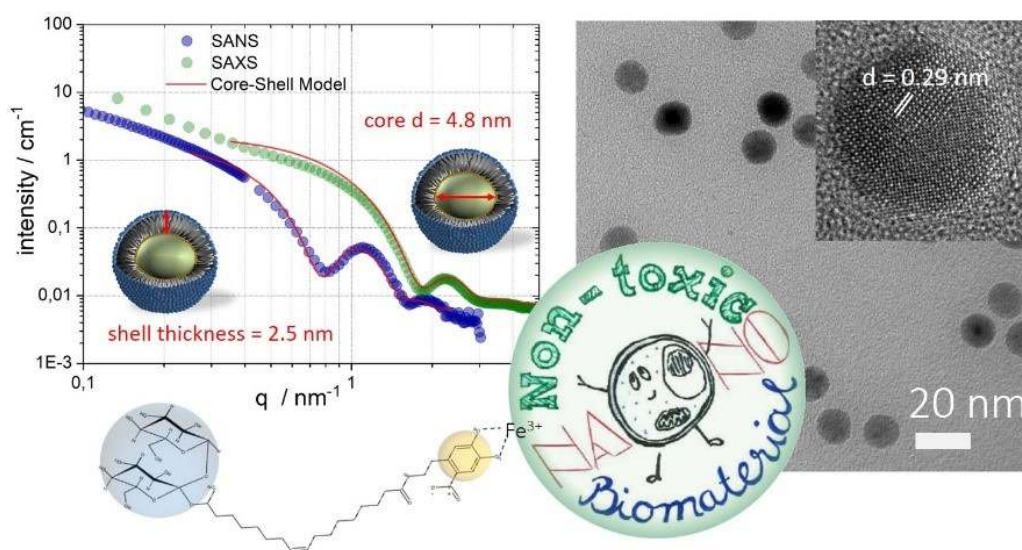


Figure 1. Small-angle neutron scattering and transmission electron microscopy data of sophorolipid-coated biomedical contrast agents, developed to reduce toxicity.

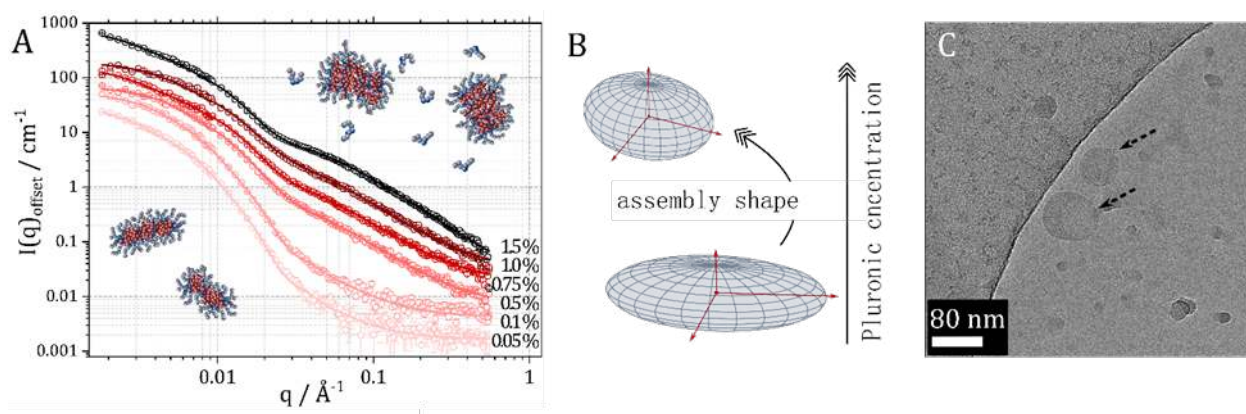


Figure 2. Small-angle neutron scattering data of rubrene-pluronic micellar assembly compared to cryo-electron images of the discoid assemblies [4].

Take home message: Biomedical materials research requires an understanding of the structures that provide the function on the nanoscale. **Only our measurements at ILL provide that detailed structure.** Nanoscale structured biomaterials save life, e.g., during the covid pandemic.

Related publications

- [1] M. Schroffenegger, N.S. Leitner, G. Morgese, S.N. Ramakrishna, M. Willinger, E.M. Benetti, and E. Reimhult, *ACS Nano*, **14**, 12708-12718 (2020)
- [2] M. Willinger and E. Reimhult, *J. Phys. Chem. B*, **125**, 7009-7023 (2021)
- [3] A. Lassenberger, A. Scheberl, K. Chaithanya Batchu, V. Cristiglio, I. Grillo, D. Hermida-Merino, E. Reimhult and N. Baccile, *ACS Appl Bio Materials*, **2**, 3095-3107 (2019).
- [4] E. Mena, E. Reimhult, S. Prevost, and A. Lassenberger, (manuscript in preparation)

Nanoskopische Struktur und Elastizität von Zellmembranen

Zusammenfassung der Aktivitäten

Biologische Membranen sind faszinierende multifunktionale Schnittstellen aus Lipiden und Proteinen in und um Zellen. Transport, Kommunikation, oder diverse katalytische Prozesse sind Beispiele für die vielfältigen Aufgaben von biologischen Membranen, die allesamt eng mit den Eigenschaften dieser nur etwa fünf Nanometer dicken Schicht verknüpft sind. Das Team um Georg Pabst an der Universität Graz, erforscht die physikalischen Eigenschaften dieser Systeme, einerseits mit Hilfe künstlicher Membranen, die in einem „Bottom-Up“ Zugang streng kontrolliert hergestellt werden, andererseits aber auch in lebenden Zellen. Ziel ist die Entwicklung neuer therapeutischer Ansätze oder Wirkstoffe; die meisten am Markt befindlichen Medikamente zielen auf Membranproteine ab. Elastische und unelastische **Neutronenstreuexperimente am ILL sind ein fester und unabkömmlicher Bestandteil** dieser Arbeiten, mit denen es gelingt, die dynamische Struktur der inneren und der äußeren Membranhälften aufzulösen, oder hierarchische Strukturen in lebenden Zellen zu bestimmen, die mit Licht- oder Elektronenmikroskopie bzw. spektroskopischen Methoden nicht zugänglich sind.

Selected scientific examples (Pabst group, Univ. Graz)

Realistic mimics of cellular envelopes

The outer membrane of all cells is characterized by an asymmetric distribution of lipids across the bilayer. Experimental protocols developed in the past ten years have enabled the study of the properties of asymmetric membrane models [1] and the potential coupling to the function of membrane proteins, which are major targets for medical drugs.

We have developed tools to analyze the leaflet-specific structure of asymmetric membranes, as well as their bending rigidity. To this end, we extensively exploit contrast variation using deuterated lipids and H₂O/D₂O mixtures to highlight or nullify specific membrane features (Fig. 1). This way, we were recently able to demonstrate that the extent of hydrocarbon chain interdigitation can either compact or expand the opposing membrane leaflet [2]. These results are qualitatively understood in terms of a balance of entropic repulsion of fluctuating hydrocarbon chain termini and van der Waals forces, which is modulated by the interdigitation depth. We also measured the mechanical leaflet coupling of asymmetric membranes using neutron spin-echo (NSE) spectroscopy [3]. The bending rigidities of most asymmetric membranes were much higher than those of membranes composed of the same lipids, but symmetrically distributed. We speculate that an asymmetric distribution of specific lipids may induce an intraleaflet coupling, which increases the weight of hard undulatory modes of membrane fluctuations and hence the overall membrane stiffness.

These distinct properties of asymmetric membrane couple to membrane proteins, providing physical means to sense and tune cell physiology. For example, we demonstrated that a membrane-hosted enzyme changes its activity when lipids are distributed asymmetrically [4].

Ultrastructure of live bacteria

We used combined very small-angle neutron scattering (VSANS)/SANS to study the ultrastructure of live *E. coli* [5]. Developing a multi-scale model that bridges the micron to nanometer length scales allowed us to derive several structural features, including cell size, membrane thickness, the thickness of the peptidoglycan layer, or packing of the lipids in the outer leaflet of the outer membranes. The model allowed us to study the activity of antimicrobial peptides on *E. coli* in real time in a follow-up study [6]. We found that the

peptides rapidly (within a few seconds) accumulate in the bacteria and kill them most likely by interacting with cytosolic molecules. This knowledge should help to design more effective antimicrobial peptides to combat infectious diseases.

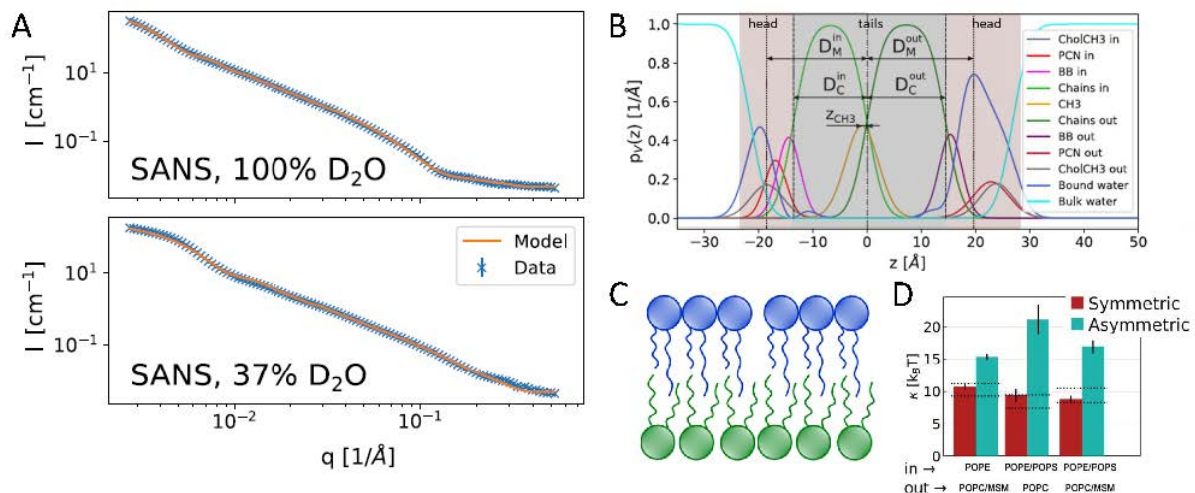


Figure 1: Structure and elasticity of plasma membrane mimics. (A): Global analysis of SANS data of asymmetric lipid vesicles at different contrast [2]. (B) Detailed membrane structure in terms of volume distribution functions of selected molecular groups. (C) Cartoon of membrane structure. (D) Comparison of bending rigidities of symmetric and asymmetric bilayers determined from NSE experiments [3].

Related publications

- [1] M. Doktorova, F.A. Heberle, **B. Eicher**, R.F. Standaert, J. Katsaras, E. London, **G. Pabst**, and D. Marquardt, *Nat. Protoc.* **13**, 2086 (2018)
- [2] **M.P.K. Frewein**, **P. Piller**, **E.F. Semeraro**, K.C. Batchu, F.A. Heberle, H.L. Scott, Y. Gerelli, L. Porcar, and **G. Pabst**, *J Membrane Biol.*, **255**, 407 (2022)
- [3] **M.P.K. Frewein**, **P. Piller**, **E.F. Semeraro**, O. Czakkel, Y. Gerelli, L. Porcar and **G. Pabst**, *Biophys. J* **122**, 2445 (2023)
- [4] **P. Piller**, **E.F. Semeraro**, G. N. Rechberger, S. Keller, and **G. Pabst**, *PNAS Nexus* 2: 1 (2023).
- [5] **E.F. Semeraro**, **L. Marx**, **J. Mandl**, **M.P. Frewein**, H.L. Scott, S. Prévost, **H. Bergler**, **K. Lohner** and **G. Pabst**, *J. Appl. Cryst* **54**, 473 (2021)
- [6] **E.F. Semeraro**, **L. Marx**, **J. Mandl**, I. Letofsky-Papst, C. Mayrhofer, **M.P.K. Frewein**, H.L. Scott, S. Prévost, **H. Bergler**, **K. Lohner** and **G. Pabst**, *eLife* **11**, e72850. (2022)

Molekulare Biostrukturen – Plasma Lipoproteine

Wissenschaftliche Kooperation der Arbeitsgruppen K. Kornmüller/R. Prassl, Medizinische Universität Graz, Österreich und J. Peters, ILL, Grenoble, Frankreich

Die Forschung an Lipoproteinen konzentriert sich auf eine der größten Herausforderungen des modernen Gesundheitswesens: Herz-Kreislauf-Erkrankungen. Sie zählen heute zu den häufigsten Todesursachen weltweit. Lipoproteine sind zuständig für den Cholesterin- und Fetttransport in unserem Körper und spielen eine wesentliche Rolle bei der Entstehung von Atherosklerose und Herz-Kreislauf-Erkrankungen.

Das Verständnis über die Struktur und Dynamik von Lipoproteinen ist dabei essentiell. Je mehr man über die atomare Struktur, molekulare Dynamik und physiologische Funktion von Lipoproteinen weiß – desto gezielter kann die Entwicklung neuer Medikamente und neuer therapeutischer Ansätze stattfinden. Genau

an dieser Schnittstelle setzt unser internationales Team an, das die wissenschaftlichen Expertisen zu Lipoproteinforschung (K. Kornmüller/R. Prassl) und Neutronenstreuung (J. Peters) bündelt, und durch den **Zugang zu führender Forschungsinfrastruktur am ILL** einzigartig neue Einblicke in die Struktur und Dynamik von Lipoproteinen liefert.

Durch die Mitgliedschaft Österreichs am ILL konnten nicht nur erstklassige Experimente an Europas führender Neutronenquelle durchgeführt werden [1-5], sondern es entstand auch eine langfristige und erfolgreiche Forschungskooperation zwischen Österreich und Frankreich (Projekte FWF/ANR I1109, FWF/ANR I 6211, OeAD WTZ FR09/2019, OeAD WTZ FR 05/2023). Nur der einzigartig hohe Neutronenfluss, gepaart mit der Vielfalt der Neutronenspektrometer am ILL erlaubten uns atomare Einblicke in den Aufbau von Lipoproteinen und deren Flexibilität [2]. So gelang es erstmals, Lipoproteine mit Neutronenstreuung unter extremen Druckbedingungen zu untersuchen (diese Forschungsergebnisse wurden 2018/19 als ILL Scientific Highlight ausgewählt: „High hydrostatic pressure specifically affects molecular dynamics and the shape of low-density lipoprotein particles“) [3-5]. In einer kürzlich durchgeführten Studie [1] haben wir verschiedene Arten von Molekularbewegungen innerhalb des Proteins Apolipoprotein B-100 (apo B-100), der Hauptproteinkomponente von Low Density Lipoprotein (LDL), durch inkohärente Neutronenstreuung an den ILL-Instrumenten IN5 und IN16b im Standard- und BATS-Modus (siehe Abb. 1 und 2) beschrieben. Durch die Kombination von drei Spektrometern erhielten wir aussagekräftige Ergebnisse für die Dynamik von apoB-100. Wir konnten zeigen, dass dieser Ansatz empfindlich genug ist, um sowohl die Beiträge des Proteins als auch des benötigten Detergens zu trennen. Es gab deutliche Unterschiede zwischen der langsamen Dynamik von apo B-100 und einer Beschleunigung in der Dynamik des Detergens in Gegenwart von apo B-100. Diese Ergebnisse sind nicht nur für das Verständnis der Proteindynamik von apo B-100 wichtig, sondern die neu entwickelte Analysemethode kann direkt auf andere Membranproteine und deren Detergenzien übertragen werden [1].



Abbildung 1: Titelbild unserer Publikation in J.Phys. Chem. Lett. [1]

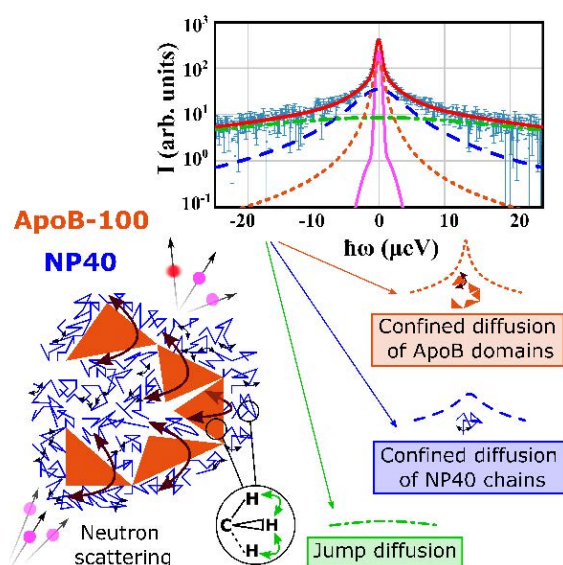


Abbildung 2: Darstellung der molekularen Bewegungen in apo B-100 aus inkohärenten Neutronenstreuungs Experimenten [1]

All diese Ergebnisse helfen, komplexe Biomakromoleküle wie Lipoproteine besser zu verstehen. Kennt man deren genaue Struktur und die molekularen Grundlagen der Cholesterinregulation und des Cholesterin- und Fetttransportes im Körper, kann man dieses Wissen gezielt ausnützen, um neue Ansätze für die Behandlung und Prävention von Herz-Kreislauf-Erkrankungen zu entwickeln.

Related publications

- [1] Cisse, A.; Schachner-Nedherer, A.-L.; Appel, M; Beck, C.; Ollivier, J.; Leitinger, G.; **Prassl, R.**; **Kornmueller, K.**; and Peters, J. Dynamics of Apolipoprotein B-100 in Interaction with Detergent Probed by Incoherent Neutron Scattering. *J. Phys. Chem. Lett.* **12** (2021) 12402–12410. DOI: 10.1021/acs.jpclett.1c03141.
- [2] **Mikl, C.**, Peters, J., Trapp, M., **Kornmueller, K.**, Schneider, W. and **Prassl, R.**, Softness of Atherogenic Lipoproteins: A Comparison of Very Low Density Lipoprotein (VLDL) and Low Density Lipoprotein (LDL) Using Elastic Incoherent Neutron Scattering (EINS). *J. Am. Chem. Soc.* **133** (2011), 13213 - 13215. DOI: 10.1021/ja203679g
- [3] **Lehofer, B.**; Golub, M.; **Kornmueller, K.**; Kriechbaum, M.; Martinez, N.; Nagy, G.; Kohlbrecher, J.; Amenitsch, H.; Peters, J.; **Prassl, R.** High Hydrostatic Pressure Induces a Lipid Phase Transition and Molecular Rearrangements in Low-Density Lipoprotein Nanoparticles. *Part. Part. Syst. Charact.* **35** (2018). DOI: 10.1002/ppsc.201800149.
- [4] Golub, M.; **Lehofer, B.**; Martinez, N.; Ollivier, J.; Kohlbrecher, J.; **Prassl, R.**; Peters, J. High hydrostatic pressure specifically affects molecular dynamics and shape of low-density lipoprotein particles. *Sci. Rep.* **7** (2017) 46034. DOI: 10.1038/srep46034.
- [5] Peters, J.; Martinez, N.; **Lehofer, B.**; **Prassl, R.** Low-density lipoproteins investigated under high hydrostatic pressure by elastic incoherent neutron scattering. *Eur. Phys. J. E Soft Matter* **40** (2017) 68. DOI: 10.1140/epje/i2017-11558-8.

ILL Scientific highlight: High hydrostatic pressure specifically affects molecular dynamics and the shape of low-density lipoprotein particles (2018/19)

Bröselnde Kreidezähne

Die Problematik der Molaren-Inzisiven-Hypomineralisation in der Kinderzahnmedizin

Univ.-Prof. Dr. Katrin Bekes, MME, Fachbereich Kinderzahnmedizin, Medizinische Universität Wien

Bei Kreidezähnen handelt es sich um eine Erkrankung der Zähne, deren Zusammensetzung des Zahnschmelzes gestört ist. Hauptsächlich betroffen sind die ersten bleibenden Backenzähne (Molaren), ggf. kommen auch die bleibenden Schneidezähne (Inzisiven) hinzu. Der Fachbegriff lautet „Molaren-Inzisiven-Hypomineralisation“ (MIH) [1-3].

Betroffene Zähne weisen weiße bis gelblich-braune Flecken auf, die in ihrer Ausprägung sehr unterschiedlich sein können. Es können nur Teilflächen oder die gesamte Zahnkrone eines Zahnes betroffen sein. Gelblich-bräunlich verfärbte Zähne neigen eher dazu zu bröseln, unabhängig davon, ob sie gut geputzt werden. Weiterhin können diese Zähne auch sehr empfindlich auf heiße und/oder kalte Reize reagieren, so dass der Genuss von Nahrungsmitteln oder die Mundhygiene schwierig werden. Kinder mit MIH leiden häufig unter chronischen Schmerzen.

Zwar schwanken die Angaben weltweit zum Vorkommen in den einzelnen Ländern stark, jedoch wird derzeit von einer durchschnittlichen Prävalenz von 13-14% ausgegangen. Die Ursachen für das Auftreten der MIH sind nicht bekannt. Vermutet wird ein multifaktorielles Geschehen während der Schmelzbildung der betroffenen Zähne. Da die betroffenen Zähne (bleibende Molaren und bleibende Inzisiven) um die

Geburt und in der frühen Kindheitsphase mineralisieren, sondiert man in der Forschung genau diese Zeitspanne. In den Fokus geraten sind hierbei Kinderkrankheiten (Bronchitiden, Pneumonien, Mittelohrentzündungen, etc.) oder Antibiotikagaben.



Ein Kreidezahn verschwindet weder von selbst (das Problem verwächst sich nicht), noch ist derzeit eine Vermeidung der Entstehung der Erkrankung möglich, da die ursächlichen Faktoren nicht hinreichend geklärt sind. Der Fokus liegt deshalb beim frühzeitigen Erkennen der Krankheit mit dem Ziel, zumindest ansatzweise die Progression der MIH (Schmelzeinbrüche) durch gezielte Behandlungen zu verhindern. Die Langzeitprognose eines betroffenen Zahnes hängt von der Stärke des Befalls und dem realisierbaren Behandlungsmodus für den Patienten ab.

Anmerkung¹²: für eine nichtinvasive Untersuchung der Struktur von solchen Kreidezähnen und deren (auch) nichtfesten Bestandteilen wurde ein Antrag auf Strahlzeit unter dem Titel „What makes chalky teeth crumble? A multimodal diffraction and QENS study on MIH-teeth“ für die Instrumente D20 und IN16B eingereicht (Partner: Univ. Tübingen, Univ. Göteborg). Eine Diskussion mit Prof.ⁱⁿ Bekes und Dr. Tangl hat gezeigt, dass weiterhin großes Interesse besteht, die klinischen Fragestellungen für dieses gesellschaftlich äußerst wichtige Thema mithilfe von Neutronenstreuungsmethoden zu beantworten. Prof. Paris hat bei biologischen Materialien, auch bei Zahnmaterial, hohe Expertise und Hilfe angeboten.

Related publications

- [1] Bekes K (2020): Molar Incisor Hypomineralization – A Clinical Guide to Diagnoses and Treatment; Editor; Springer Verlag; ISBN 978-3-030-31601-3; <https://www.springer.com/de/book/9783030316006>
- [2] Bekes K (2021): Molaren Inzisiven Hypomineralisation; Quintessenz; ISBN 978-3-86867-561-0; <https://www.quintessence-publishing.com/deu/en/product/molaren-inzisiven-hypomineralisation>
- [3] Bekes K (2022). Molar Incisor Hypomineralization; Quintessenz; ISBN 978-1-78698-124-0; <https://www.quintessence-publishing.com/deu/de/product/molar-incisor-hypomineralization>

¹² Anmerkung durch M. Fally nach Diskussionen mit Prof.ⁱⁿ Bekes und Dr. Tangl, Med. Univ. Wien

2 Materials science and condensed matter physics – novel materials

Nanoporöse Materialien für eine erfolgreiche Energiewende

Eine wesentliche Komponente für einen vollständigen Wechsel auf erneuerbare Energien ist die Lösung des Speicherproblems auf verschiedenen Zeitskalen. Die Arbeitsgruppe „*Synchrotron Radiation and Neutrons for Energy Materials (SyNergy_Mat)*“ von Oskar Paris an der Montanuniversität Leoben beschäftigt sich mit nanoporösen Materialien für elektrische, chemische oder mechanische Energiespeicherung. So kann z.B. elektrische Energie in sogenannten Superkondensatoren sehr viel schneller als in Lithiumionenbatterien gespeichert und auch wieder abgegeben werden. Mit Aktivkohle als Elektrodenmaterial und Salzwasser als Elektrolyt wären solche Systeme nicht nur sehr schnell und effizient, sondern auch umweltfreundlich, leicht verfügbar und preiswert, also insgesamt in jeder Hinsicht nachhaltig. Eine ganz andere Anwendung nanoporöser Materialien ist die (Langzeit-) Speicherung von Gasen, z.B. Wasserstoff als chemischen Energieträger der Zukunft bei typischerweise zehnmal kleinerem Druck als z.B. in Stahltanks bei vergleichbarer Speicherkapazität. Eine dritte Anwendung ist die Speicherung von (elastischer) Verformungsenergie durch erzwungenes Einbringen von Wasser in hydrophobe (also wasserabweisende) Poren unter hohem Druck. Ein fundamentales Verständnis der unterschiedlichen physikalisch- / chemischen Mechanismen der Energiespeicherung in solchen Systemen erfordert komplexe Untersuchungen atomarer bzw. molekularer Vorgänge auf der sehr kleinen Längenskala der Nanoporen. Neutronen stellen hierfür eine einzigartige Sonde dar, da sie besonders sensitiv auf Wasserstoffkerne, und damit sowohl auf Wasser, z.B. im Elektrolyten von Superkondensatoren, oder auf den Wasserstoff bei dessen Speicherung in den Nanoporen, sind. Für die Untersuchung der *Struktur* (wo der Wasserstoff bzw. das Wasser in den Poren genau ist) und der *Dynamik* (wie sich Wasserstoff/Wasser in den Poren bewegt) ist der hohe **Neutronenfluss des ILL in Grenoble unerlässlich**, da die Untersuchungen üblicherweise „in-situ“, also während dem Beladen und Entladen der entsprechenden Speichersysteme erfolgen. Insbesondere die **Komplementarität von Neutronenstreuung am ILL und Synchrotronstrahlung** (z.B. an der ESRF in Grenoble) hat sich dabei als äußerst fruchtbar erwiesen.

Selected scientific examples (Paris group, Montanuniversität Leoben)

X-rays and neutrons unravel the role of water in aqueous supercapacitor electrodes

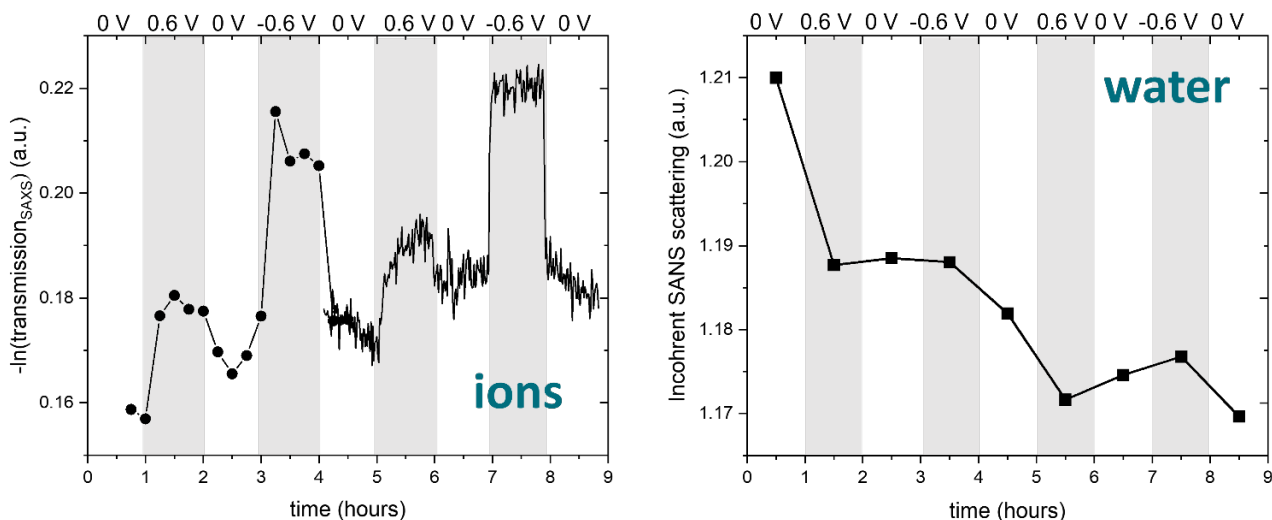


Figure 1: In-situ X-ray transmission (left) and incoherent neutron scattering (right) deliver directly ion- and water concentration changes, respectively, upon positive and negative charging of an electrode for two consecutive cycles [1].

Supercapacitors offer a promising solution for efficient high-power storage and release of electrical energy. Yet, the current fundamental understanding of the electric double layer (EDL) formation in confinement of nanoporous carbon electrodes is still limited. We employ in-situ small-angle scattering of X-rays (SAXS) and

neutrons (SANS), aiming at unraveling charge storage mechanisms, global ion- and water concentration changes in the electrodes, as well as local ion- and water rearrangement at the electrode-electrolyte interface. While SAXS is suitable to elucidate the ion behavior upon charging and discharging, SANS as a hydrogen sensitive technique enables a contrast variation of the aqueous solvent (H_2O and D_2O) to shed detailed light on the role of the solvent water. This complimentary approach substantially advances the current understanding of supercapacitors and particularly the active role of water in such devices, promoting the development of future devices with balanced energy- and power-density.

Neutrons probe local hydrogen density in carbon nanopores

The nanoporous structure of activated carbons with sub-nanometer pores can efficiently store hydrogen at cryogenic temperatures at much lower pressure compared to pressure vessels. To further improve storage systems, deepening our knowledge of the fundamental processes of atomistic solid-gas interactions is crucial. The fully reversible process of physisorption leads to pore size dependent densification of the adsorbed gas. As neutrons are very sensitive to hydrogen and its isotopes, SANS is an excellent tool to investigate the physical processes within the nano-confinement during loading and unloading. In this study we performed in-situ H_2 and D_2 adsorption experiments at different temperatures and pressures, and employed a hierarchical contrast model to quantify the hydrogen density as a function of pore size. As a main result, the density approaches or even exceeds the liquid density of hydrogen in the smallest pores at ambient pressure and temperatures far above the critical point of hydrogen.

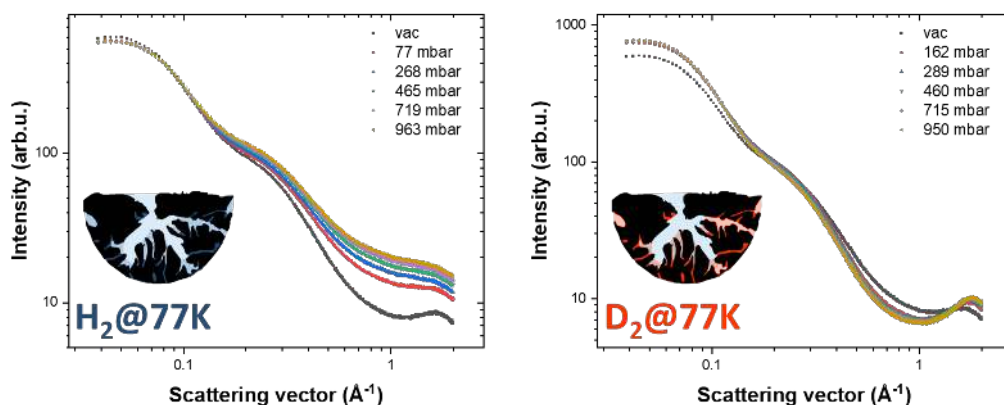


Figure 2: SANS curves from an activated carbon sample at 77 K and different external gas pressures of hydrogen (H_2 , left) and deuterium (D_2 , right).

Neutrons quantify superhydrophobic pore deformation upon water intrusion and drying

Materials containing a large volume of so called superhydrophobic or ultrahydrophobic nanopores with wetting angle $> 150^\circ$ are attractive for mechanical energy storage applications. In this study, the elastic pore deformation of ordered cylindrical nanopores with superhydrophobic silica walls was studied by SANS during forced water intrusion and spontaneous drying [2]. No pre-wetting film is formed in this case, resulting in a strongly different deformation behavior as compared to hydrophilic pores (Figure 3). A mechanical model was developed to quantitatively describe the bowtie-shaped deformation isotherm for hydrophobic pores from SANS. The model not only allows estimating the Young's modulus but also the Poisson ratio of the nanoscale silica walls. This work complements and extends previous studies on adsorption induced deformation of hydrophilic pores towards a generic understanding of the underlying processes with some important practical implications.

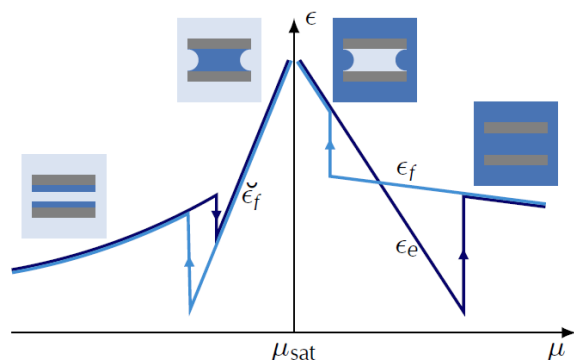


Figure 3: Schematics of adsorption induced deformation of hydrophilic ($\mu < \mu_{\text{sat}}$) and hydrophobic ($\mu > \mu_{\text{sat}}$) nanopores, with the chemical potential μ of the external fluid in the vapor state (left) and in the liquid state (right).

Related publications

- [1] **M. Seyffertitz, S. Stock, M.V. Rauscher**, C. Prehal, S. Haas, L. Porcar, **O. Paris**, *Faraday Discussions* (2023) accepted [doi: 10.1039/d3fd00124e](https://doi.org/10.1039/d3fd00124e).
- [2] L. Michel, **L. Ludescher**, V. Cristiglio, E. Charlaix, **O. Paris** and C. Picard. *Langmuir* **38**, 211 (2022)

Operando Neutronenstreuung an Post-Lithium-Ionen Batterien

Zusammenfassung der Aktivitäten

Batterien sind eine der Schlüsseltechnologien, um die Abhängigkeit von fossilen Brennstoffen zu reduzieren. Sowohl für den Einsatz in der Elektromobilität als auch für die stationäre Speicherung von erneuerbaren Energien müssen zukünftige Batterien nachhaltiger, kostengünstiger und leistungsfähiger werden. Metall-Schwefel-Batterien könnten bahnbrechend sein in dieser Hinsicht.

Die durch einen **ERC Starting Grant** geförderte Forschungsgruppe rund um Christian Prehal an der Universität Salzburg an will die zu Grunde liegenden Mechanismen der Phasenumwandlung in Metall-Schwefel-Batterien identifizieren und daraus effizientere Möglichkeiten der Schwefelumwandlung ableiten. Dazu werden zeitaufgelöste „Operando“ Neutronenkleinwinkel-streuung und Cryo-Elektronenmikroskopie, mit Machine-learning unterstützter Datenanalyse kombiniert. Damit kann die komplexe Strukturbildung auf der Nanometerskala direkt, während des Ladens und Entladens verfolgt werden. Die daraus abgeleiteten Designprinzipien sollen schließlich in Prototypen mit hoher Energiedichte und Lebensdauer umgesetzt werden.

Die **hohe Strahlintensität der ILL-Neutronenquelle** erlaubt es zeitaufgelöste «operando» Messungen mit einzigartiger Datenqualität durchzuführen und somit ein grundlegendes Verständnis über Prozesse auf der Nanometerskala zu entwickeln. Die **ILL-Mitgliedschaft Österreichs ist daher essenziell** für die Forschung und die zukünftige Realisierung von nachhaltigen Post-Lithium-Ionen Batterien.

Selected scientific examples (Prehal group, Universität Salzburg)

On the nanoscale structural evolution of solid discharge products in Lithium-Sulfur batteries using operando scattering

The incomplete understanding of the mechanism that reversibly converts sulfur into lithium sulfide (Li_2S) via soluble polysulfides hinders the realization of high-performance Li-S batteries. Conventionally, Li_2S formation is attributed to the direct electroreduction of a polysulfide into Li_2S ; however, this explanation does not align with the observed size and morphology of the insulating Li_2S deposits.

In this research example, operando small and wide angle X-ray scattering (SAXS/WAXS) was combined with operando small angle neutron scattering (SANS) to track the growth and dissolution of solid deposits from atomic to sub-micron scales during charge and discharge [1] (Figure 1a). Using stochastic modelling based on the SANS data we quantified the chemical phase evolution during discharge and charge (Figure 1b-c). Machine learning methods further improved the analysis and lowered the computation time of the SANS stochastic model fits by orders of magnitude. Together with supplementary data from electron microscopy and Raman spectroscopy, we could demonstrate that the deposit consists of the expected nanocrystalline Li_2S and smaller solid Li_2S_x nanoparticles. Our findings align with solid Li_2S_2 precipitating from solution and then being partially converted in the solid state to Li_2S , likely through a process involving direct electroreduction and chemical diffusion through the Li_2S_2 particle network. The found mechanism may explain why not all S is converted to Li_2S ; a certain amount of Li_2S_2 remains as a second solid discharge product.

The example on Li-S batteries highlights the importance of real-time structural information on nanoscopic length scales to understand complex transformations in sustainable post-lithium-ion batteries. It demonstrates the great potential of operando neutron scattering combined with stochastic modeling and machine learning in quantifying reaction and storage mechanisms in future electrochemical energy storage systems [1-3].

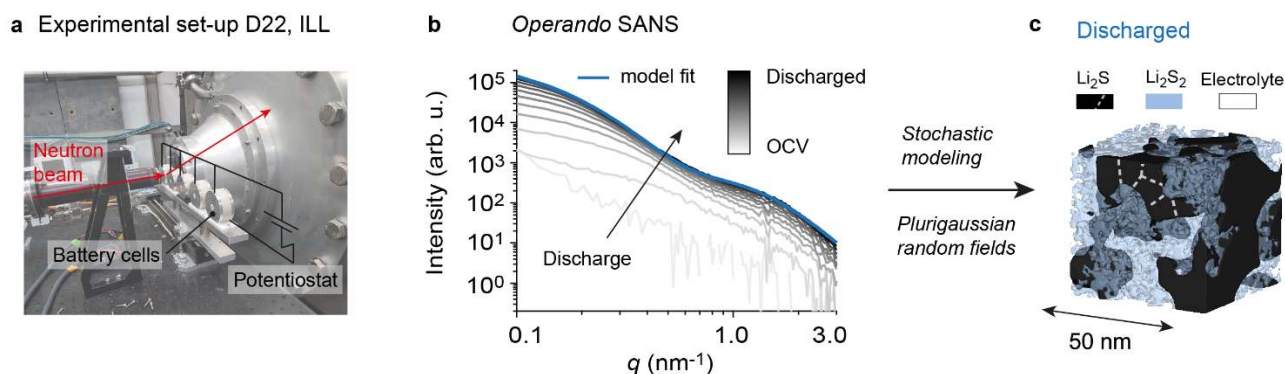


Figure 1: a, Sketch of operando SANS experimental set-up at the D22 beamline at ILL. The change in the SANS scattering intensity was recorded during discharging and charging five Li-S battery cells. b, Operando SANS intensities during discharge. c, 3D Li_2S - Li_2S_2 composite structure derived from a model fit in (b) and stochastic modelling (Plurigaussian random fields)

Related publications

- [1] C. Prehal, J.M. von Mentlen, S. D. Talian, A. Vizintin, R. Dominko, H. Amenitsch, L. Porcar, S. A. Freunberger, V. Wood, *Nature Communications* **13**, 6326 (2022)
- [2] C. Prehal, A. Samojlov, M. Nachtnebel, L. Lovicar, M. Kriechbaum, H. Amenitsch, S. A. Freunberger, *PNAS* **118**, e2021893118 (2021)
- [3] C. Prehal, H. Fitzek, G. Kothleitner, V. Presser, B. Gollas, S. A. Freunberger, Q. Abbas, *Nature Communications* **11**, 4838 (2020)

Highlights:

November 2022: **ERC Starting Grant** SOLIDCON, *Systems Materials Engineering for High-Rate Bulk Solid-State Conversion in Metal-Sulfur Batteries*, Paris-Lodron Universität Salzburg

Die Presse – print und online: Mit Röntgenblick zu besseren Materialien, 17.02.2023,
https://www.diepresse.com/6252985/mit-roentgenblick-zu-besseren-materialien?ref=ues_a

Nanoscale structure and molecular motion at carbon materials & interfaces

Zusammenfassung der Aktivitäten

Messung der Dynamik und Struktur von Atomen und Molekülen auf Oberflächen und in Nanomaterialien. Untersuchung von Prozessen relevant für Dünnschichtwachstum und die Halbleiterindustrie. In erster Linie allerdings Grundlagenforschung um ein tieferes Verständnis der Bewegung einzelner Moleküle und Atome auf Oberflächen zu erhalten – mit Relevanz für Schichtwachstum, katalytische Reaktionen, Wasserstoff als Energiespeicher etc. .

- Die genannten Bewegungen sind auf atomarer Ebene so schnell, dass andere experimentelle Techniken diesen nicht folgen können bzw. nur wenn die Bewegung stark verlangsamt wird [1].
- Die Ergebnisse sind Teil der Habilitationsschrift von Anton Tamtögl sowie eines kürzlich verfassten Review-Artikels [1]. **Messungen am ILL sind zudem essentieller Bestandteil** der Ausbildung von Doktorand*innen [2] als auch von Masterstudent*innen im Rahmen der Teilnahme an der dortigen summer school [3].

Selected scientific examples (Tamtögl group, Technische Univ. Graz)

How does tuning the van der Waals bonding strength affect adsorbate structure?

In a recently manuscript based on neutron diffraction and spin-echo measurements at the ILL [2], we illustrated that for pyrazine, ($C_4H_4N_2$), adsorbed on the graphite (see Figure 1) a direct correlation between the intensity of van der Waals bonding and the stability of self-assembled overlayers exists: Due to nitrogen atoms in the six-membered ring of pyrazine the van der Waals bonding is increased in comparison to benzene (C_6H_6), which only contains carbon atoms.

Ultrafast molecular transport on carbon surfaces: The diffusion of ammonia on graphite

Using neutron time-of-flight spectroscopy we were able to resolve the ultrafast diffusion process of adsorbed ammonia, NH_3 , on graphite [4]. The data shows that ammonia follows a hopping motion on graphite with a diffusion constant at 94 K determined as $D = 3.9 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$. It illustrates that diffusion of ammonia on graphite is a very rapid process, comparable to the diffusion of molecular hydrogen and much faster than the diffusion of larger molecules, such as benzene. Considering in particular the mass of the molecule, together with the unusual tilted $NH-\pi$ bonding, makes the observed diffusion uniquely fast. The activation energy extracted for the diffusive motion is about 4 meV and thus the NH_3 /graphite system shows a rather unusual combination of a weakly corrugated potential energy surface together with a significant friction.

A molecular mechanism to reduce the diffusion barrier via adsorbate geometry:

Triphenylphosphine on graphite

We used neutron time-of-flight (Figure 2) and spin-echo to follow the nanoscopic motion of triphenylphosphine ($P(C_6H_5)_3$) adsorbed on exfoliated graphite [3]. Molecular dynamics at temperatures up to about 300 K is dominated by rotations of the molecule and flapping motion of the phenyl groups while with increasing temperature the molecular motion is dominated by translational diffusion, as complemented by force-field molecular dynamics simulations. Together with van der Waals corrected density functional theory calculations we illustrate that upon change of adsorption geometry compared to

molecules with a flat geometry the adsorption energy of $P(C_6H_5)_3$ increases while the diffusion barrier remains low.

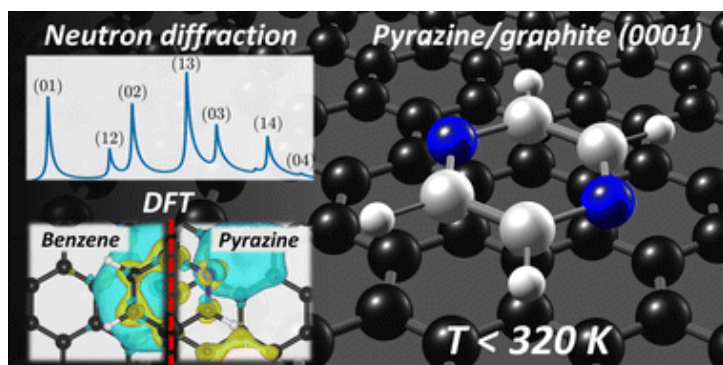


Figure 1: The binding and structure of an ordered pyrazine overlayer on graphite are studied with neutron scattering and DFT. We find increased van der Waals bonding and stability of the overlayer compared to benzene, due to the nitrogen atoms in the ring.

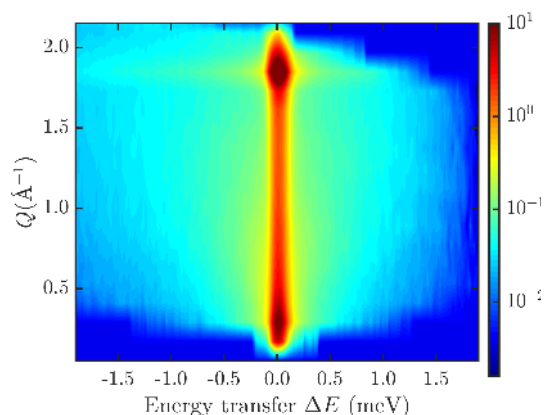


Figure 2: Two-dimensional contour plot of the dynamic scattering function extracted from neutron time-of-flight spectra for exfoliated graphite covered by $P(C_6H_5)_3$ at 500 K.

Related publications

- [1] Sacchi, M. and Tamtögl, A. Adv. Phys. X 8, [2134051](#) (2023).
- [2] Maier, P., Xavier, N. F., Truscott, C. L., Hansen, T., Fouquet, P., Sacchi, M. & Tamtögl, A. Phys. Chem. Chem. Phys. 24, [29371-29380](#) (2022).
- [3] Tamtögl, A., Schwab, V., Sacchi, M., Koza, M. M. and Fouquet, P. in preparation (2023)
- [4] Tamtögl, A., Sacchi, M., Calvo-Almazán, I., Zbiri, M., Koza, M. M., Ernst, W. E. & Fouquet, P. Carbon 126, [23-30](#) (2018).

Role of defects in the origin of relaxor behavior in barium titanate based ceramics

Zusammenfassung der Aktivitäten

Kondensatoren, welche auf Keramiken basieren, haben eine Reihe von Vorteilen: sie sind platzsparend, gewichtsparend, und effizienter im Vergleich zu polymerbasierten Kondensatoren, die üblicherweise in Elektroautos verwendet werden. Keramik-Kondensatoren können aber nur dann sinnvoll eingesetzt werden, wenn man deren Energiedichte erhöht. Neutronenbasierte Messungen am ILL ermöglichen es, die Auswirkung von verschiedenen Elementen auf die Energiedichte experimentell zu erkennen. Diese Information ist schlüssig, um mithilfe von computerbasierten Modellen neue Kondensatoren mit erhöhter Energiedichte zu designen, welche Elektroautos effizienter machen können.

- Die Mitgliedschaft beim **ILL ist unerlässlich**, um das in Österreich exzellent aufgestellte Gebiet des computergestützten Materialdesigns – vor allem in Energiethemen – mit hochwertigen Experimenten auf atomarer Ebene zu unterstützen.

Selected scientific examples (Deluca group, Mat. Center Leoben)

Role of defects in the origin of relaxor behavior in barium titanate based ceramics

Relaxor ferroelectrics (ReFE) are chemically modified ferroelectric materials, where the chemical substitution disrupts the long-range ferroelectric order, resulting in a fragmentation of polar order on the length scale of a few unit cells (cf. Figure 1). This results in an increased energy density when ReFE are used for en-

ergy storage, due to the decreased polarization losses. The aim of the **ERC Grant CITRES (GA 817190, www.erc-citres.eu)** is to tune the chemical composition of barium titanate-based ReFE to achieve maximized energy density. Within the associated **FWF Grant POLDERS (I4581-N)** we investigate the atomic scale distortions leading to the disruption of long-range ferroelectricity in barium titanate substituted by homovalent and heterovalent cations at the perovskite B-site. The goal is to use the atomic-scale experimental evidence to build realistic Molecular Dynamics models, in order to predict the energy storage properties for numerous complex chemical substitutions in barium titanate (BaTiO_3).

At ILL, we investigated Zr^{4+} (homovalent) and Nb^{5+} (heterovalent) substituted BaTiO_3 (BZrT and BNbT, respectively). BNbT requires charge compensation in the form of Ti vacancies (V_{Ti}). In such case, the off-center Nb^{5+} cations at the B-site in combination with V_{Ti} produce a ‘slush-like’ polar structure, where the defect induced static polar lattice distortion induce random fields extending beyond the nearest-neighbors [2]. This mechanism is different from the one present in the case of homovalent substitutions (BZrT), where the sources of lattice distortion are only from the ionic radii difference and thus influence the lattice polarization only locally. We further investigated a system with Zr^{4+} and Nb^{5+} co-substitution, for which preliminary dielectric analyses showed an unexpected shift of the permittivity maximum well below room temperature. Neutron total scattering and corresponding atomic pair-distribution function (PDF) allowed us to directly access the local structure information of these materials on the atomic level. Moreover, the Q-independence of the scattering length allowed us to obtain large scattering contributions from light elements such as oxygen, which is important for probing cation defects contribution. Neutron scattering data allow us to formulate a comprehensive picture of the order-disorder at the perovskite B-site, which serves as basis for high-throughput simulations to estimate electrical properties (e.g. polarization) at unit cell scale and correlate them with the macroscopic material behavior [3, 4].

The contribution of neutron measurements at ILL is thus essential to investigate the atomic properties of substituted perovskite systems, enabling us to construct realistic models of the atomic structure, from which the macroscopic properties of the materials can be predicted.

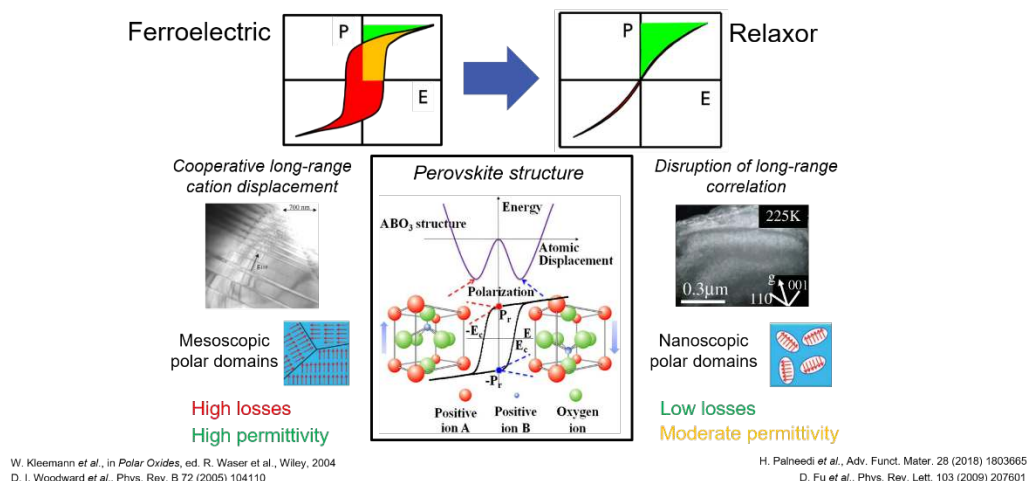


Figure 1: Comparison between ferroelectrics and relaxor ferroelectrics [1].



Figure 2: Molecular dynamics simulation of local displacements of B-site cations in BaTiO_3 (BT) and BNbT above the Curie temperature. Green squares indicate cation vacancies and black edges indicate Nb sites (Courtesy of M. Pasciak, Institute of Physics, Czech Academy of Sciences).

Related publications

- [1] **M. Deluca.** *IEEE International Symposium on the Application of Ferroelectrics.* Cleveland (USA), June 2023.
- [2] **V. Veerapandiyan, M. N. Popov, F. Mayer, J. Spitaler,** S. Svirskas, V. Kalendra, J. Lins, G. Canu, M. T. Buscaglia, M. Pasciak, P. B. Groszewicz, V. Buscaglia, J. Hlinka, **M. Deluca.** *Adv. Electron. Mater.* **8**, 2100812 (2021).
- [3] **F. Mayer, M. N. Popov,** P. Ondrejko, J. Hlinka, **J. Spitaler, M. Deluca.** *Phys. Rev. B.* **106**, 224109 (2022).
- [4] **F. Mayer, M. Deluca, M. N. Popov.** *Phys. Rev. B.* **107**, 184307 (2023).

Angewandte Grenzflächenphysik

Zusammenfassung der Aktivitäten

Unsere Forschung konzentriert sich auf Grenzflächen und darauf, wie sich molekulare Wechselwirkungen und Zusammensetzung verändern, wenn an diesen Grenzflächen Prozesse auf der nanoskopischen und molekularen Skala stattfinden. Unsere Neutronenforschung fokussierte sich in den letzten Jahren auf wie gelöste Ionen biologische Materialien, wie eine synthetische Zellwand, beeinflussen und modifizieren. Wir sind besonders daran interessiert, wie sich Materialien verhalten, wenn sie zwischen andere Materialien gepresst werden, wie es in der Natur bei Adhäsion, Schmierung etc... vorkommt. Für den Zugang zu diesen Grenzflächen ist ein hoher Neutronenfluss unerlässlich. Dieser ermöglicht es uns, die Zusammensetzung an verborgenen und (re)aktiven Grenzflächen mit hoher Auflösung zu verstehen, z. B. eine Veränderungen des Wassergehalts an sonst unzugänglichen Stellen.

Selected scientific examples (Valtiner group, Technische Univ. Wien)

Hydration of lipid bilayers and their mimics

Interactions between lipid bilayers are essential to a range of biological functions, such as intracellular transport. Surface charging and how ions adsorb or desorb from the headgroups have an influence on the interaction forces. In our recent paper [1] we used sensitive force measurements between two lipid bilayers that are brought into close contact, in the surface forces apparatus (SFA), to determine the effect of surface charging on the interaction forces under physiological conditions. Steric hydration forces from the interfacial ions were found to dominate. The model system used to mimic the lipid bilayer included a strongly hydrophilic, non-lipid, inner layer. Therefore, neutron reflectometry (NR) measurements (Figure 1) were key to determining that the model system was not changed by the salt conditions without confinement.

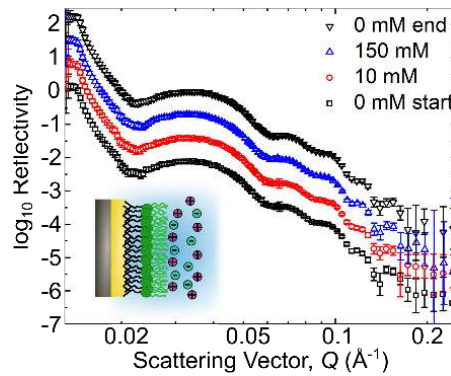


Figure 1: NR data shows no change to the system with NaCl concentration.

We are also interested in how materials are changed by confinement, i.e. by being pressed between two surfaces, which occurs in natural processes including lubrication. The interfaces become difficult to access and, hence, penetrating radiation, such as neutrons, are vital. Joint lubrication was the topic of a recent ILL PhD studentship proposal, although unsuccessful, it received positive feedback and we are keen to reapply. Univ. Ass. Dr Laura Mears (Univ. Prof. Markus Valtiner's Applied Interface Physics group at TU Wien) has a great deal of experience with neutrons probing confined soft matter, teaching a course on the topic. **Membership of the ILL directly influenced her choice to move to Austria.** In her career she plans to continue to use neutrons and build her independent group here in Vienna.

Related publications

[1] V. Wieser, L. L. E. Mears, R. Barker, H-W. Cheng and M. Valtiner. *J. Phys. Chem. Lett.* **12** (2021): 9248 - 9252.

Inelastic neutron scattering to probe strongly correlated electronic and phononic matter

Starke Korrelationen sind ein zentrales Thema bei der Erforschung kondensierter Materie, meist in Form von Korrelationen zwischen Elektronen. Unter bestimmten Bedingungen können jedoch auch in rein phononischen Systemen starke Korrelationen gefunden werden. Inelastische Neutronenstreuung (INS) ist bestens geeignet, um beide Arten stark korrelierter Materie zu untersuchen. Das Schwere-Fermionen-Metall $\text{Ce}_3\text{Pd}_{20}\text{Si}_6$ weist zwischen Phasen multipolarer Ordnung eine besonders interessante Art von Quantenkritikalität auf. Mit Hilfe der Drehmomentmagnetometrie haben wir das Temperatur-Magnetfeld-Phasendiagramm als Funktion des Winkels zwischen dem Magnetfeld $\mathbf{B}$ und den kristallographischen Richtungen kartiert. Die somit neu entdeckte Phase II'' wurde daraufhin mit elastischer und inelastischer Neutronenstreuung untersucht. Das magnetische Anregungsspektrum deutet darauf hin, dass diese neue Phase einen anderen Ausbreitungsvektor hat als die zuvor identifizierten Phasen [1]. In einer intermetallischen Clathratverbindung haben wir eine detaillierte Studie der Temperaturabhängigkeit der niederenergetischen akustischen und „Rattling“-Moden durchgeführt, um den Phonon-Kondo-Effekt zu untersuchen [2].

Selected scientific examples (Bühler-Paschen group, Technische Univ. Wien)

Identification of the propagation vector of the newly discovered AFQ phase II'' in $\text{Ce}_3\text{Pd}_{20}\text{Si}_6$

The heavy fermion metal $\text{Ce}_3\text{Pd}_{20}\text{Si}_6$ exhibits an antiferroquadrupolar (AFQ) phase II below $T_Q = 0.5$ K and an antiferromagnetic (AFM) phase III below $T_N = 0.31$ K [3]. Most recently, we discovered the presence of a new phase transition for field direction close to $[112]$ with so far unknown order parameter. To shed light on the

transition from phases II' to II'', we performed an experiment at the cold-neutron triple-axis spectrometer THALES (ILL, Grenoble), where we firstly measured the elastic intensity of the magnetic Bragg peak for $q = (111)$ as a function of magnetic field. Here we found that the field-induced Bragg intensity vanishes in phase II'' indicating that the propagation vector of this phase lies outside the scattering plane. Further insight about the possible ordering vector can be obtained from its excitation spectrum. We expect that it coincides with the minimum in the dispersion of field-induced collective excitations, which would then represent the analog of a Goldstone mode for the hidden-order phase. By using inelastic neutron scattering, we mapped out four clearly resolved collective modes (see Fig. 1) of which the lowest-energy has a minimum close to the orthogonal projection of (010) onto our scattering plane, suggesting that $q = (010)$ could be the propagation vector of phase II'' [1].

The phonon-Kondo effect in intermetallic clathrates

Intermetallic clathrates are of great interest, not only for their potential as thermoelectric materials but also for fundamental interest in their unusual lattice dynamics. It is now well documented that these materials exhibit energetically low-lying optical phonon modes which correspond to the rattling motion of the guest atoms in the structural cages [2-4]. To scrutinize the newly proposed model of the phonon Kondo effect we utilized inelastic neutron scattering at the thermal neutron three-axis spectrometer IN8 at ILL. Here we studied the temperature dependence of the low-energy phonon dispersion in the vicinity of the optic mode-acoustic mode interaction on the type-I clathrate $\text{Ba}_8\text{Cu}_{4.8}\text{Ge}_{40.2}\text{Ga}$ to probe the characteristic disentanglement of the two modes above the phonon Kondo temperature T_K . To identify the anti-crossing wavevector we mapped the transverse phonon dispersion at 50 and 200 K, see Fig. 2; this q region was then explored as a function of temperature. The results show a clear phononic flat band next to the Brillouin zone boundary where $q = (6 \ 0.48 \ 0.48)$ corresponds to the wave vector where the hybridization is strongest. Furthermore, to fully access the mode disentanglement, we demonstrated a logarithmic relation of the phonon's energy shift above 50 K, consistent with the proposed model of phonon Kondo scattering [2-5].

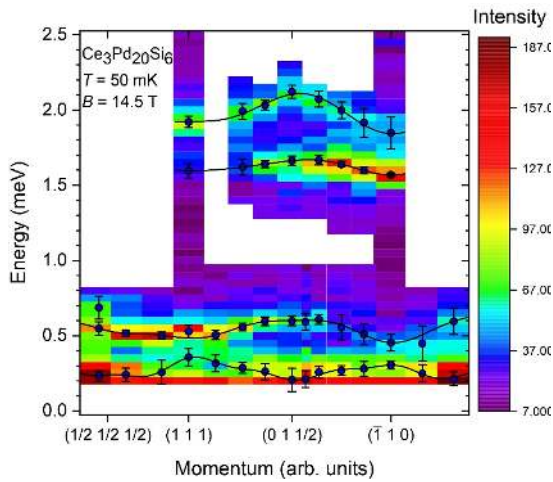


Fig. 1: color map that shows the intensities of the field-induced magnetic satellites across the Brillouin zone with the fitted peak positions

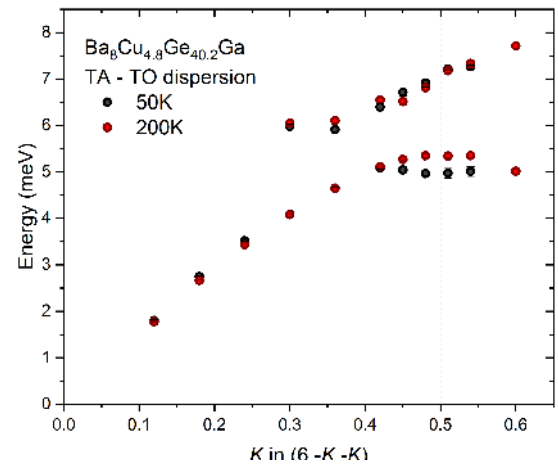


Fig. 2: the transverse phonon dispersion of $\text{Ba}_8\text{Cu}_{4.8}\text{Ge}_{40.2}\text{Ga}$ measured at 50 and 200 K

Related publications

- [1] F. Mazza et al., *Phys. Rev. B* **105**, 174429 (2022)
- [2] M. Ikeda et al., *Nat. Commun* **10**, 887 (2019)
- [3] V. Martelli et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **116**, 17701 (2019)
- [4] P-F. Lory et al., *Nat. Commun* **8**, 491 (2017)

Magnetic soft matter

Neue Materialien, wie z. B. die sogenannte magnetische weiche Materie, haben häufig völlig neue und unerwartete Eigenschaften. In unseren Forschungen konnten wir flüssige Ferromagneten beobachten [1,2] oder auch die makroskopische Längenänderung (im cm-Bereich!) von magnetischen Elastomeren unter Einwirkung schwacher magnetischer Felder untersuchen [3]. Um diese zu verstehen und für Anwendungen optimieren zu können, ist es notwendig solche Materialien mit Methoden zu untersuchen, die sensitiv auf magnetische Eigenschaften sind und gleichzeitig tief aus dem Inneren des Materials Informationen liefern können. Die **weltweit besten Methoden** in dieser Hinsicht sind die verschiedenen Techniken der Streuung polarisierter Neutronen, wie sie am **Institut Laue Langevin** perfektioniert und angeboten werden.

Selected scientific examples (Klepp group, Univ. Wien)

Ferromagnetic ferrofluids

Mixtures of nanometer-sized magnetic platelets in liquids are examples of so-called ferrofluids that exhibit interesting properties. It has been shown that above a certain concentration of platelets, such mixtures are found in the so-called ferromagnetic nematic phase (where the term "phase" is referring to the state of matter, like "gaseous phase" or "solid phase"). In the ferromagnetic nematic phase the ferrofluid shows orientation of the platelets along a certain direction and, furthermore, exhibits magnetization even without an external magnetic field applied (see Fig. 1), as it is the case for usual ferromagnets (like the ones people use to fix notes and bills on their fridges). Our results [1] show that in the absence of an external magnetic field, short range positional and orientational order of the platelets already exist at relatively low platelet concentration. Small angle scattering of polarized neutrons (with defined spin direction) revealed that the contribution of ferromagnetic ordering to the formation of the nematic phase is significant. Further research using neutrons revealed spontaneous stripe formation (formation of elongated "magnetic domains") in a ferromagnetic ferrofluid in the presence of an oscillating external magnetic field [2]. The fluid in adjacent stripes moves in opposite directions despite the applied magnetic field being uniform (due to chiral symmetry breaking).

Take home message: Ferromagnetic ferrofluids (magnetic nanoplatelets in liquids) can behave like liquid ferromagnets in some ways. The mechanism behind such properties was revealed by application of polarized-neutron scattering techniques.

Magnetoactive elastomers

Magnetoactive elastomers (MAEs) are magnetic composite materials, like polymer matrices filled with magnetic particles of a couple micrometers size. The growing interest in MAEs originates from the possibility of controlling some of their physical properties by application of external magnetic fields. For example, MAEs can be shrunk and stretched by varying a relatively weak external magnetic field, provoking motion. The physical reason for the observed changes in MAE properties are field-induced reconfigurations of the microstructure formed by the magnetic particles within the elastic polymer. Ultra small angle scattering of polarized neutrons is especially suitable to observe reconfigurations in bulk materials containing micrometer-sized magnetic particles, due to the sensitivity of the technique to large magnetic structures and the neutrons' ability to penetrate relatively thick samples [3].

We were able to observe that the material's properties are depending on its "magnetic field history": Neutrons are scattered from the internal structure formed due to the external magnetic fields that have

been applied to it *previously* (see Fig. 2). Consequently, one can tell the former magnetic field exposure from the scattering pattern. Such observations using neutrons are necessary to understand the underlying processes to be able to deploy MAEs for robotics applications or as sensors, for instance.

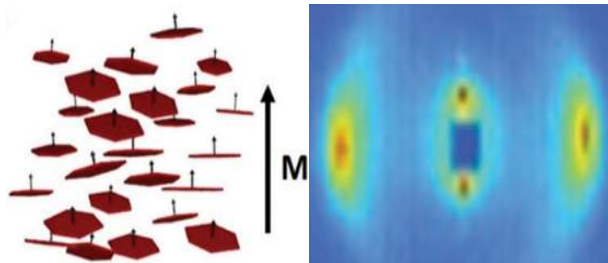


Figure 1: The ferromagnetic nematic phase of magnetic nanoplatelets (left). Neutron detector image for a certain platelet concentration, showing positional and magnetic ordering (right).

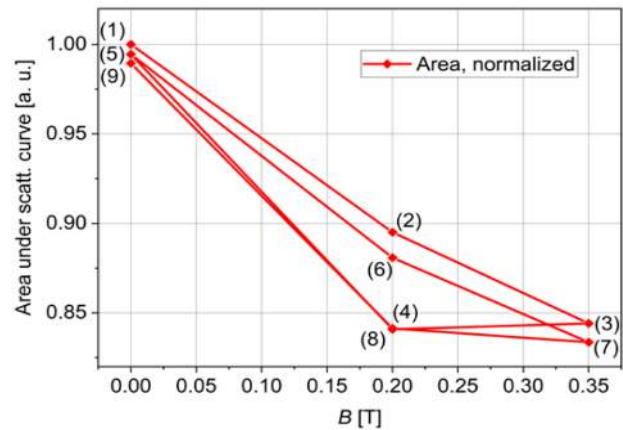


Figure 2: Neutron scattering [3] depending on the magnetic field exposure history (hysteresis) of applied field strengths (1) to (9).

Related publications

- [1] A. Mertelj, B. Lampret, D. Lisjak, **J. Klepp**, J. Kohlbrecher, M. Copic. *Soft Matter* **15**, 5412 (2019)
- [2] M. Vilfan, B. Lampret, Z. Gregorin, L. Cmok, A. Vilfan, **J. Klepp**, J. Kohlbrecher, P. H. Bostjancic, D. Lisjak, A. Mertelj, *Small*, 2304387 (2023)
- [3] I. A. Belyaeva, **J. Klepp**, **H. Lemmel**, M. Shamonin, *Appl. Sci.* **11**, 4470 (2021)

3 Foundations of Physics

Quantum Physics

Wie können wir uns die kleinsten Bausteine der Materie vorstellen? Eher wie Teilchen – oder eher wie Wellen? Vor etwas mehr als einem Jahrhundert war das eine der verwirrendsten und umstrittensten Fragen der Physik. Heute wissen wir: Beide Sichtweisen gehören zusammen. Teilchen können Welleneigenschaften haben – und Wellen können Teilcheneigenschaften haben.

Besonders einfach lässt sich das bei Photonen zeigen, den elementaren Bestandteilen des Lichts. Aber auch Materieteilchen, die eine Masse haben, zeigen manchmal wellenartiges Verhalten. Sie bewegen sich nicht auf eindeutig festgelegten Bahnen, nach den Gesetzen der Quantenphysik können sie sich im Raum verteilen, ähnlich wie sich eine Welle auf einer Wasseroberfläche ausbreiten kann.

Auf besonders spektakuläre Weise wurde das im Jahr 1971 von Prof. Helmut Rauch am Wiener Atominstitut demonstriert: Er schoss Neutronen auf einen speziellen Kristall – und zwar so, dass sich die Neutronenwelle aufspaltete und sich jedes einzelne Neutron gleichzeitig auf zwei völlig verschiedenen Pfaden bewegte, die dann wieder an einen Punkt zusammengeführt wurden. In diesem Fall überlagern sich die beiden Teilwellen, sie können einander entweder verstärken oder einander auslöschen – und diese Interferenzeffekte sind es, mit denen die Wellennatur der Neutronen bewiesen wird.

Neutronen für solche Experimente zu verwenden, hat mehrere Vorteile: Im Gegensatz zu Elektronen oder Protonen sind Neutronen elektrisch neutral – daher stoßen sie einander nicht ab und werden nicht so leicht

von äußeren elektromagnetischen Feldern gestört. Im Gegensatz zu neutralen Atomen haben sie relativ wenig Masse und damit eine vergleichsweise große Wellenlänge – typischerweise in der Größenordnung von etwas unter einem Nanometer, das entspricht ungefähr dem Abstand zwischen den Atomen in festen Materialien.

Deshalb eignen sich Neutronenwellen hervorragend, um Materialien, Oberflächen und winzige Strukturen zu untersuchen: Die Neutronen werden gestreut, ihre Wellenform wird auf charakteristische Weise verändert, und daraus kann man dann wertvolle Information ablesen. Für die moderne Materialforschung und viele andere Anwendungsbereiche ist die Neutronenstreuung somit ein unverzichtbares Werkzeug geworden.

Freilich sind dafür relativ aufwändige Forschungsanlagen notwendig. Man braucht dafür möglichst starke Neutronenquellen – etwa einen Kernreaktor, wie jenen am Atominstitut im Wiener Prater, oder noch **deutlich leistungsfähigeren Reaktor am ILL in Grenoble.**

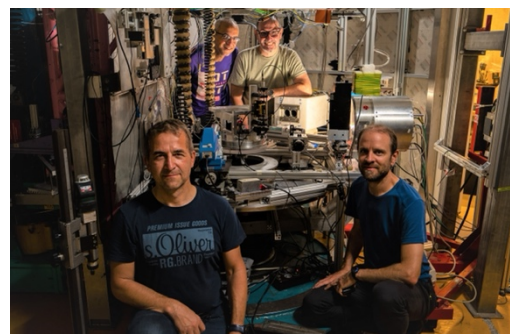
Neutronenforschung ist daher immer auch Gemeinschaftsarbeit: Während Versuchsanlagen für Röntgen- oder Elektronenstreuung problemlos von einzelnen Instituten aufgebaut und betrieben werden können, werden große Neutronenquellen oft von Forschungsteams aus vielen unterschiedlichen Herkunftsorten gemeinsam genutzt. Durch die optimale Nutzung der verfügbaren Strahlzeiten und durch den Aufbau technischer Expertise wird dafür gesorgt, dass die Anlagen den größtmöglichen Nutzen haben – für die moderne Spitzenforschung und die Gesellschaft.

Selected scientific examples

Das S18: Neutroneninterferometer und USANS (Technische Univ. Wien, Atominstitut: Hasegawa, Lemmel, Sponar, Abele)

Seit etwa 45 Jahre betreibt die TU Wien den Strahlplatz S18 am ILL. Gemäß dem „CRG“-Kollaborationsvertrag zwischen TU Wien und ILL steht die Hälfte der Strahlzeit der TU Wien zur freien Verfügung während die andere Hälfte im Rahmen des Proposalsystems des ILL vergeben wird. Die **ILL-Mitgliedschaft** Österreichs ist für den Betrieb des S18 **zwingend notwendig.**

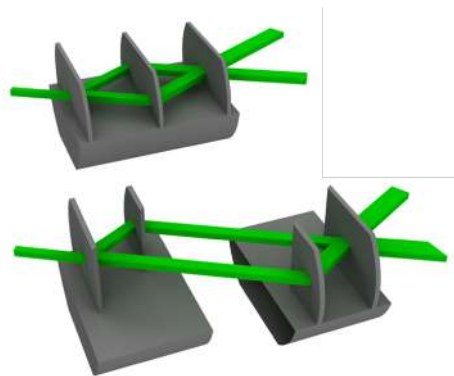
Das S18 ermöglicht Experimente in den Bereichen USANS (Ultrakleinwinkel-Neutronenstreuung) und Neutroneninterferometrie. USANS dient der Untersuchung von Materialstrukturen in der Größenordnung 0,1 bis 10 μm , beispielsweise von porösen Gesteinen. Die Neutroneninterferometrie dient vor allem der Untersuchung von Neutronen im Kontext der Quantenphysik. Die Technik entstammt österreichischer Pionierarbeit aus den 1970er-Jahren von *Helmut Rauch*. Sie basiert darauf, dass sich Neutronen wie Wellen verhalten und gleichzeitig zwei räumlich getrennte Wege gehen. Das S18 ist trotz seines Alters das weltbeste Instrument auf diesem Gebiet. (Das zweitbeste befindet sich am NIST in den USA, an einer deutlich schwächeren Neutronenquelle als dem ILL). Am S18 entstanden im Laufe der Zeit über 200 wissenschaftliche Publikationen und 40 Diplom-, Doktorarbeiten und Habilitationen.



Erstes Neutroneninterferometer aus getrennten Kristallen

Einer Kollaboration aus TU Wien, INRIM Turin und ILL Grenoble gelang es erstmals, ein Neutronen-Interferometer aus zwei getrennten Kristallen zu betreiben.

Ein Neutroneninterferometer für thermische Neutronen kann nur funktionieren, wenn die Siliziumkristalle, die als Strahlteiler dienen, in Position und Winkel extrem genau zueinander ausgerichtet werden. Eine Verschiebung um einen Atomabstand (190 Pikometer) erzeugt bereits eine volle Oszillation der Interferometer-Phase. Das gleiche gilt für die Verdrehung eines Kristalls um ein Millionstel Grad. Mit dieser Winkelgenauigkeit könnte man einen Basketballkorb auf dem Mond von der Erde aus treffen. Aufgrund dieser Anforderungen sind herkömmliche Neutroneninterferometer aus einem einzigen großen Siliziumkristall gefertigt, so dass die einzelnen Strahlteiler über die gemeinsame Basisplatte verbunden bleiben. Diese Technik beschränkt die Größe des Interferometers allerdings auf die maximale Größe eines Kristalls, ungefähr 20 cm.



Diese Limitierung wäre aufgehoben, könnte man zwei getrennte Kristalle so genau zueinander einjustieren wie eingangs beschrieben. Genau das ist 2021 in einem ersten Testexperiment gelungen. Seitdem läuft die Arbeit an einem robusten Setup, finanziert durch das Projekt NextPi der Quantum-Austria-Initiative des FFG. Erste Anwendungen wären Experimente im Bereich der dunklen Energie und Einflüsse der Gravitation im Quantenbereich.

[1] **H. Lemmel**, M. Jentschel, **H. Abele** et al. *J. Appl. Cryst.* **55**, 870–875 (2022)

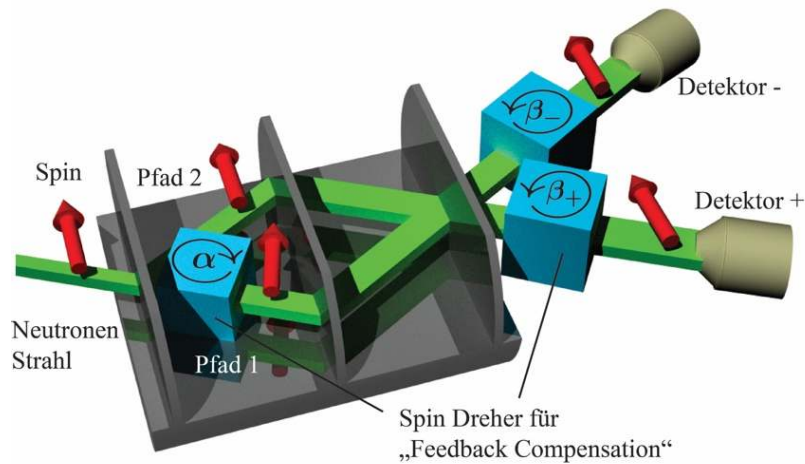
[2] ILL-Highlight: <https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/a-quantum-wave-in-two-crystals>

Pfadbestimmung im Doppelspalt

Welchen Pfad ein Teilchen im Doppelspalt nun wirklich geht, konnte erstmals für einzelne Teilchen geklärt werden.

Eines der grundlegendsten Experimente der Quantenphysik ist das Doppelspaltexperiment. Schießt man Teilchen auf zwei nebeneinander liegende Spalte, haben sie die Möglichkeit, durch den einen oder den anderen Spalt zu fliegen. Dadurch entsteht hinter dem Doppelspalt ein Interferenzmuster, das sich zwanglos aus den Welleneigenschaften der Teilchen erklären lässt. Doch wie funktioniert das genau? Ist jedes einzelne Teilchen eine Welle, die sich teilen kann, oder geht mal ein Teilchen links und mal ein Teilchen rechts, wie das die de-Broglie-Bohm-Theorie postuliert? Lange gab es keine experimentelle Möglichkeit, um diese Fragen zu beantworten. Denn sobald man direkt misst, wo das Teilchen entlang fliegt, verschwindet das Interferenzmuster, weil die Messung den Zustand der Teilchen verändert. Interferieren können nur Teilchen, die sich „unbeobachtet fühlen“. Mittels sogenannter „*Schwacher Mes-sungen*“ ist es in den letzten Jahren gelungen, Messungen so durchzuführen, dass die Quantensysteme so gut wie nicht verändert werden. Allerdings war das Ergebnis immer ein Mittelwert über viele Teilchen und konnte nichts über

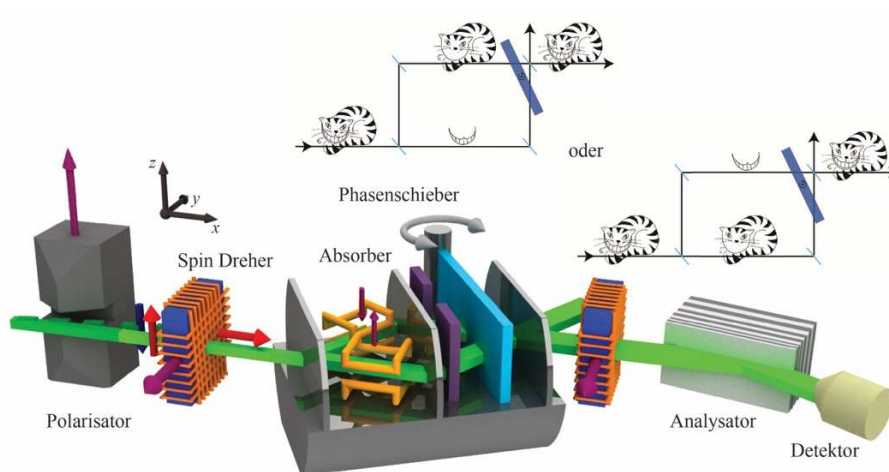
einzelne Teilchen aussagen. Durch die neue Methode der „Feedback Compensation“ wurde nun auch diese Hürde genommen. Im Experiment zeigte sich, dass die Neutronen beispielsweise zu 1/3 den einen Weg und zu 2/3 den anderen Weg nehmen, und zwar jedes einzelne Neutron für sich.



- [3] **H. Lemmel, N. Geerits, A. Danner, H. F. Hofmann, S. Sponar**, *Phys.Rev.Res.* **4**, 023075 (2022)
- [4] **H. Lemmel, S. Sponar, H.F. Hofmann**, *Spektrum der Wissenschaft*, 2022-11-01
- [5] ILL-Highlight: <https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/a-quantum-wave-in-two-crystals>

Quanten Grinse Katze

Spätestens seit den Arbeiten von Erwin Schrödinger haben Quantenphysiker wohl eine Vorliebe für Katzen. So auch für die Grinsekatz aus dem Kinderbuch „Alice im Wunderland“ von Lewis Carroll aus dem Jahr 1865. Nachdem Alice in einem Kaninchenbau einen Durchgang in eine surrealistische Welt findet begegnet sie dort einer Katze, über die sie sich sehr wundert: *«Oh, ich habe oft eine Katze ohne Grinsen gesehen, aber ein Grinsen ohne Katze, so etwas Merkwürdiges habe ich in meinem Leben noch nicht gesehen.»*. Eine solche auf den ersten Blick absurd anmutende Trennung einer Eigenschaft von ihrem Objekt ist in quantenmechanischem Sinne tatsächlich umsetzbar. Dabei stellen polarisierte Neutronen, die nur in einem Pfad des Interferometers anzutreffen waren, quasi die Katzen dar, während der Neutronenspin das Grinsen verkörpert und nur im anderen Pfad zu finden ist. Um die physikalische Eigenschaft, also den Spin von Neutron zu separieren, bedarf es einer speziellen Messmethode, die als „schwachen Messung“ bezeichnet wird. Hierbei wird Information über das physikalische System extrahiert, ohne dass dieses nachhaltig gestört wird. Unser am ILL durchgeführtes Experiment wurde im Fachjournal *Nature Communications* veröffentlicht und erregte auch in mehreren nationalen und internationalen Tageszeitungen (z.B. die Presse u. BBC News) sowie in populärwissenschaftlichen Medien Aufsehen. Interessant zu erwähnen ist ebenfalls die Tatsache, dass sich die Zuordnung von Neutron und Spin zu den jeweiligen Pfaden auch noch während der Laufzeit, also wenn sich das Neutron bereits im Interferometer befindet, durch entsprechende Spinmanipulation nach dem Interferometer umkehren lässt. Effekte dieser Art werden in der experimentellen Quantenmechanik oft unter dem Begriff „Retrokausalität“ eingeordnet.



[6] T. Denkmayr, H. Geppert, S. Sponar, H. Lemmel, A. Matzkin, J. Tollaksen, and Y. Hasegawa, *Nat. Commun.* **5**, 4492 (2014)

[7] R. Wagner, W. Kersten, H. Lemmel, S. Sponar, and Y. Hasegawa, *Sci. Rep.* **13**, 3865 (2023)

ILL Scientific highlight: A quantum way in two crystals

<https://www.ill.eu/news-press-events/press-corner/press-releases/scientists-separate-a-particle-from-its-properties>

Neutroneninterferometrie mit hoher Winkelauflösung (Zawisky, Abele group, Techn. Univ. Wien, Atominstytut)

Unsere Experimente am ILL mit großen Kristall Interferometern zeigen eine extreme Winkelverstärkung des einfallenden Neutronenstrahls. Diese Winkelsensitivität erscheint schon bei kleinsten Abweichungen vom Bragg Winkel. Um die Winkelauflösung zu maximieren wurden spezielle Interferometer Designs und Messtechniken entwickelt. Mit dem aktuell weltgrößten Interferometer Kristall wird am ILL eine Winkelsensitivität von 10^{-6} Bogensekunden angepeilt.

Anwendungen

Effekte durch die Erdrotation und Gravitation

Die sogenannte Corioliskraft tritt auf wenn sich der Neutronenstrahl nicht parallel zur Erdrotationsachse bewegt. Auf Grund der hohen Winkelsensitivität [1] ist es zum ersten Mal am ILL gelungen die Coriolisablenkung nachzuweisen [2]. Ein weiterer Effekt verursacht durch die Erdrotation ist der sogenannte Sagnac Effekt, der proportional mit der Strahlfläche des Neutroneninterferometers zunimmt. Alle Rotations- und Gravitations-experimente erfordern daher große Interferometerkristalle und sind daher spannende Anwendungen für die aktuell von uns am ILL entwickelten „geteilten Interferometer“ [3].

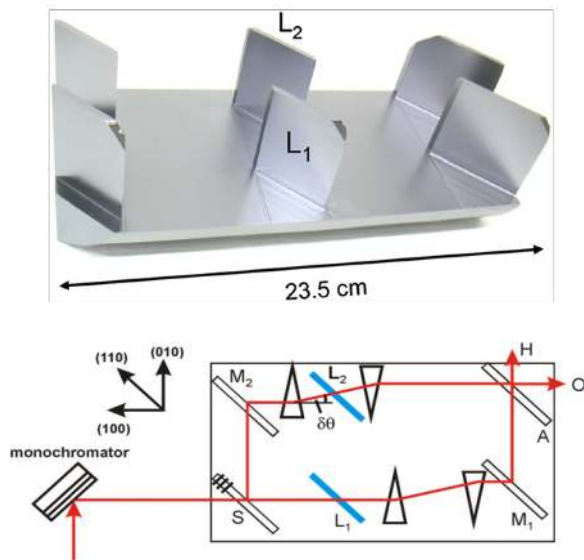


Figure 1: Großes Kristallinterferometer (oben)
Messung der Winkelauflösung (unten)

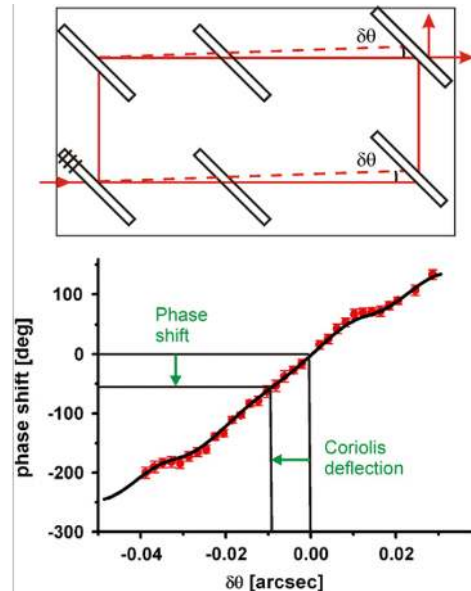


Figure 2: Messung der Coriolisablenkung

Related publications

- [1] M. Zawisky, J. Springer, H. Lemmel. *Nucl. Instr. Methods A* **634**, 46 (2011)
- [2] T. Potocar, M. Zawisky, H. Lemmel, J. Springer, M. Suda. *Acta Cryst. A* **71** (2015).
- [3] H. Lemmel et al. *J. Appl. Cryst.* **55**, 870 (2022)

Optik mit sehr kalten Neutronen

Für die Aufklärung von Strukturen werden häufig Streumethoden, z.B. mittels Röntgenstrahlung oder Neutronen, eingesetzt. Eine Bedingung für effiziente Streuung ist, dass die Wellenlänge der verwendeten Neutronen in der Größenordnung der Struktur ist. Bei kristallinen Festkörpern bewegen wir uns im Bereich von etwa einem Zehntel Nanometer. Wenn man also gewöhnlich über Neutronenstreuung spricht, geht man davon aus, dass diese ein Spektrum in diesem Wellenlängen-bereich haben („thermische Neutronen“). Umgekehrt können dann Kristalle als neutronenoptische Komponenten z.B. als Spiegel, Strahlteiler oder Interferometer, genutzt werden (siehe Beitrag über S18). Letztere erlauben es, fundamentale physikalische Fragen zu beantworten. Für **sehr kalte Neutronen** mit etwa zehn- bis hundertfacher Wellenlänge (1 – 10 nm) müssen künstliche Strukturen geschaffen werden, welche als neutronenoptische Komponenten wirken können. Dies lohnt sich, da die Wechselwirkung der Neutronen – Materie mit zunehmender Wellenlänge sogar quadratisch ansteigt, Messungen werden in der Regel also sensibler. Wir designen daher mittels holographischer lichtoptischer Methoden periodische Strukturen im 100 nm-Bereich, welche diesen Anforderungen genügen. Der Aufbau eines Interferometers aus solchen künstlichen Gittern ist im Rahmen eines rezent genehmigten FFG Projekts im Rahmen der Quantum Austria Initiative im Entstehen.

Das **Institut-Laue Langevin ist derzeit die einzige Neutronenquelle weltweit**, welche eigene Strahlplätze mit ausreichendem Neutronenfluss anbieten kann, um Interferometrie und Diffraktion bei diesen Wellenlängen betreiben zu können.

Holographically prepared neutron diffractive elements with outstanding properties

The choice of materials is essential to generate artificial structures having the required neutron optical properties. Therefore, the search for those has been boosted a decade ago with the first beam splitters, mirrors and is still ongoing with ever refined properties [1, 2]. Keeping in mind the goal to set up a very-cold-neutron interferometer with highest sensitivity and using artificial gratings, one of the major difficulties remains the accurate alignment of three of them in a row. To facilitate this procedure, the thickness of the gratings should be small while having high efficiencies which unfortunately scale up with the thickness at the same time. A solution to this is to maximize the periodic contrast, e.g., by using appropriate nanoparticles. We found that nanodiamonds are an excellent choice in constructing holographic nanoparticle-polymer composite transmission gratings with large saturated refractive-index modulation amplitudes (contrast) at very cold neutron wavelengths, resulting in efficient control of neutron beams [2, 3]. Nanodiamond possesses large coherent, small incoherent scattering and low absorption cross sections at very cold neutron wavelengths. This makes them ideal candidates for use in an interferometer.

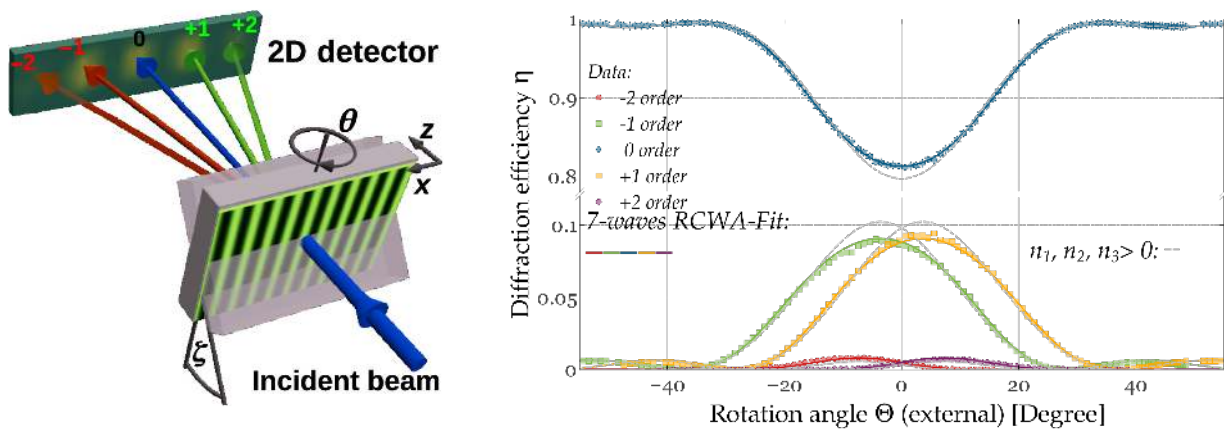


Figure: (left) Schematic of the setup for very cold neutron diffraction by a nanodiamond transmission grating. (right) Measured angular dependence of the diffraction efficiency (five orders) at the neutron wavelength of 1.7 nm. The RCWA fit (solid curves) allows to retrieve amplitudes **and** phases of the grating's Fourier components.

Retrieving the phases of onedimensional periodic structures by diffraction experiments

Sophisticated, data and time consuming techniques have been developed to retrieve the phase information which is lost in diffraction experiments. Surprisingly, we could demonstrate how to retrieve the refractive index profile of photonic structures by standard diffraction experiments. We used the rigorous coupled-wave analysis (RCWA) in the multi-wave coupling regime without the need for taking any auxiliary data. In particular, we demonstrated by means of simple examples – one-dimensional, non-sinusoidal phase gratings – how such an approach to a solution to the phase problem of diffraction can be obtained with not more than the usual experimental effort in diffraction experiments. The technique is applicable to samples generating diffraction patterns for any type of radiation useful for structure determination (X-rays, electrons, laser light, and neutrons, for instance). In particular, we showed how the phases of the Fourier components of a onedimensional periodic structure can be fully recovered by deliberately choosing a probe wavelength of the diffracting radiation much smaller than the lattice constant of the structure. We accurately determined the slight asymmetry of the structure of nanocomposite phase gratings by light and neutron diffraction measurements [4].

Related publications

- [1] **P. Flauger**, M. A. Ellabban, G. Glavan, **J. Klepp**, **C. Pruner**, T. Jenke, P. Geltenbort, and **M. Fally**. *Polymers* **11**, 1459 (2019)
- [2] Y. Tomita, A. Kageyama, Y. Iso, K. Umemoto, A. Kume, M. Liu, **C. Pruner**, T. Jenke, S. Roccia, P. Geltenbort, **M. Fally**, and **J. Klepp**. *Phys. Rev. Appl.* **14**, 044056 (2020)
- [3] E. Hadden, **M. Fally**, Y. Iso, T. Jenke, **J. Klepp**, A. Kume, K. Umemoto, Y. Tomita, submitted for publication *Adv. Opt. Materials* (2023)
- [4] **M. Fally**, Y. Tomita, A. Fimia, R. Madrigal, J. Guo, J. Kohlbrecher, and **J. Klepp**. *Opt. Express* **29**, 16153 (2021)

Fundamental physics

Es gibt Fragen, die die Menschheit schon immer beschäftigen. Wo kommen wir her, wo gehen wir hin, wie begann alles? Gibt es eine Urkraft, auf die sich alles zurückführen lässt? Und immer wieder die Faustische Frage: was die Welt im Innersten zusammenhält? Diesen Fragen geht die Neutronen- und Quantenphysikgruppe am Atominstitut der TU Wien nach. Unsere sichtbare Welt, angefangen bei den kleinsten Strukturen der Quarks bis hin zu den Galaxienhaufen am Rande des Universums, lassen sich durch das sogenannte Standard Modell der Elementarteilchen erklären. Heute gerät dieses Modell an seine Grenzen und zeigt sich als unvollständig. Als alternative Beschreibungen werden die Supersymmetrie, Stringtheorien oder andere große Vereinheitlichungstheorien diskutiert. Gerade Fragen der Teilchenphysik bei höchsten Energien und der Kosmologie werden inzwischen durch Experimente auf dem anderen, niederenergetischen Ende der Energieskala beantwortet und zwar mit kalten und ultrakalten Neutronen.

Es ist ein Glücksfall, dass viele präzise messbare Größen der Neutronenphysik mit diesen Theorien „hinter dem Standardmodell“ verknüpft sind. So ist das elektrische Dipolmoment des Neutrons im Rahmen des Standardmodells praktisch Null, die Supersymmetrie sagt aber eine Größe in einem inzwischen durch Experimente eingeschränkten Bereich vorher. Die Lebensdauer des Neutrons legt z. B. die Neutronendichte etwa eine Sekunde nach dem Urknall fest, die für die frühe Synthese der ersten Elemente zur Verfügung stand und zu dem beobachteten Heliumanteil von 25 % in unserem Universum führt. Die für die Rechnungen benötigten Wirkungsquerschnitte der schwachen Wechselwirkung, wie z. B. die Neutrino-Querschnitte, werden nicht direkt gemessen, sondern aus den Neutronendaten berechnet.

Immer drängender wird eine Reihe essentieller offener Fragen. Als Beispiel sei genannt: Warum blieb nach dem Urknall so viel Materie (etwa wir mit unserer Erde) und so wenig Antimaterie übrig? - Gibt es weitere zusätzliche Dimensionen von Raum und Zeit? - War die Natur von Beginn an linkshändig? - Waren die Naturkonstanten immer gleich? - Können schwarze Löcher im Labor untersucht werden? - Ist Antimaterie denselben Gesetzen unterworfen wie Materie?

Die meisten Experimente werden am TRIGA-Reaktor am Atominstitut vorbereitet und am **ILL in Grenoble** durchgeführt. Einige dieser Experimente können nur dort durchgeführt werden, da das **ILL weltweit über die stärkste ultrakalte Neutronenquelle verfügt.**

Selected scientific examples

Neutron β -decay and the weak coupling constants (I. Pradler, H. Abele)

Lang lebe das Neutron! Was nach einem Trinkspruch bei der Einweihung eines Experiments zur Messung der Neutronenlebensdauer klingt, ist in Wahrheit der Wunsch nach einem Hinweis auf neuartige Physik, die sich nicht mit einem Lebensdauerwert im Rahmen des Standardmodells der Elementarteilchen erklärt lässt werden. Es ist auch die Hoffnung, einen Weg zu finden, der über oder mit dem Neutron zu einem neuen Standardmodell führt, das die zeitliche Entwicklung unseres Universums vom Big Bang über immer komplexere Strukturbildung im Universum bis hin zu habitablen Gegenden auf Planeten beschreibt. Seit einiger Zeit weisen verschiedene Messergebnisse in der Teilchenphysik auf Abweichungen vom Standardmodell hin, und auch Messungen zur Neutronenlebensdauer geben Rätsel auf. Die Messgenauigkeit ist in der Regel durch die Beobachtungszeit gegeben und letztlich bei Experimenten mit Neutronen durch eine Lebensdauer von ca. einer Viertelstunde begrenzt.

Als mögliche Lösung des dunkle Materie-Problems über eine Aufklärung des Lebensdauerpuzzles stellten Bartosz Fornal and Benjamín Grinstein im Jahr 2019 die Hypothese auf, dass die obige Beschreibung unvollständig sei und es beim Neutronenzerfall einen zusätzlichen Zerfallskanal geben könne mit hypothetischen Teilchen im Endzustand, die, falls stabil, einen Anteil an der unbekannten dunklen Materie im Universum haben könnten.

Durch die PERKEO II und PERKEO III Messungen dominiert, berechneten wir die Neutronenlebensdauer unter Zuhilfenahme von supererlaubten Kernbeta-Zerfällen. Das Ergebnis ist $\tau = (879.4 \pm 1.0) \text{ s}$, sehr verträglich mit der direkten Messung der Neutronenlebensdauer durch Speicherexperimente. Wir halten dadurch das Problem der Neutronenanomalie gelöst, s. ILL Scientific Highlight.

Outside the nucleus, a free neutron is unstable and decays into a proton, an electron and an electron antineutrino. Electron spectrum of a free neutrons decay is continuous in shape and has an endpoint energy of 782 keV. Integration of the spectrum over energy gives the neutron decay rate from which various observables, like for example neutron life time, can be calculated. Besides the neutron lifetime there are many other observables, which can be described by the so-called correlation coefficients (a , A , B , D are angular correlation coefficients; b is called the Fietz term). Within the framework of the Standard Model of particle physics many processes share the same Feynman diagram. Coupling constants have to be determined in neutron decay to describe and reconstruct these processes. Therefore, high-precision measurements of angular correlations in neutron beta decay address a number of questions which are at the forefront of particle physics. Moreover, the use of dispersion relation, lattice quantum chromodynamics and effective field theory framework allows for high-precision theory calculations at the level of 10^{-4} , turning neutron beta decay into a powerful tool to search for new physics, complementary to high-energy collider experiments.

PERC (Proton Electron Radiation Channel) is the new generation neutron beta-decay facility that aims to measure correlation coefficients with high accuracy (10^{-4}). The 12 m long superconducting magnet system of the PERC experiment was designed by Techn. Univ. Wien in collaboration with Techn. Univ. München. The experiment is currently under construction at the Technical University of Munich, FRM II/MLZ. PERC is the successor of the PERKEO-III, which is the experiment of the PERKEO group, which established the pulsed neutron beam technique. That made it possible to study free neutron decay practically without background.

The most precise calculation of the Cabbibo-Kobayashi-Maskawa quark mixing matrix element V_{ud} comes from free neutron beta decay experiments. The calculation requires two experimental inputs only. These

are neutron life time ($\tau = (877.75 \pm 0.33) \text{ s}$, $\Delta\tau/\tau = 3.8 \times 10^{-4}$, UCNT (LANL)) and nucleon-axial coupling ($\Delta\lambda/\lambda = 4.4 \times 10^{-4}$, PERKEO-III (ILL) [2]. With a factor of 2 improvement in accuracy, the most precise determination of V_{ud} will come from neutron beta decay, thus replacing nuclear beta decay.

For a new generation of beta decay experiments, like the PERC, frequency-based beta spectroscopy methods using the cyclotron radiation emitted by electrons in a homogeneous magnetic field have been emerging as a new method for high-precision electron energy measurements. Design study of the CREScent experiment, a proof-of principle experiment aiming to combine the CRES (Cyclotron Radiation Emission Spectroscopy) technique with the signal amplification qualities of an RF cavity, is being exploited at the Atominstitut/Techn. Univ. Wien.

Related publications

- [1] Klopff M., **Jericha E.**, Märkisch B., Saul H., Soldner T., **Abele H.**: *Constraints on the dark matter interpretation $n \rightarrow \chi + e^+ e^-$ of the neutron decay anomaly with the PERKEO II experiment*. Physical Review Letters **122**, 222503-1-4 (2019) doi: [10.1103/PhysRevLett.122.222503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.222503)
- [2] Märkisch B., Mest H., Saul H., Wang X., **Abele H.**, Dubbers D., Klopff M., Petoukhov A., Roick C., Soldner T., Werder D.: *Measurement of the weak axial-vector coupling constant in the decay of free neutrons using a pulsed cold neutron beam*. Physical Review Letters **122**, 242501-1-7 (2019) doi: [10.1103/PhysRevLett.122.242501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.242501)
- [3] Saul H., Roick C., **Abele H.**, Mest H., Klopff M., Petukhov A.K., Soldner T., Wang X., Werder D., Märkisch B.: *Limit on the Fierz interference term b from a measurement of the beta asymmetry in neutron decay*. Physical Review Letters **125**, 112501-1-7 (2020) doi: [10.1103/PhysRevLett.125.112501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.112501)

ILL Scientific Highlight: <https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/accurate-measurement-of-the-weak-axial-vector-coupling-constant>

ILL Scientific Highlight: <https://www.ill.eu/news-press-events/news/scientific-news/no-dark-side-to-neutron-decay>

Selected scientific examples

Calibrated nuclear Recoils for Accurate Bolometry „CRAB“ (Abele, Jericha, Technische Univ. Wien)

Auf der Suche nach dunkler Materie und bei der Erforschung der Physik (jenseits) des Standardmodells mittels der kohärenten elastischen Neutrino-Kern-Streuung („coherent elastic neutrino-nucleus scattering“ – CEvNS) kommen in der aktuellen Forschung aufgrund ihrer beispiellosen Effizienz immer häufiger kryogene Detektoren zum Einsatz. Die Wechselwirkung der zu untersuchenden Teilchen mit den Atomen der Detektorkristalle findet dabei in einem Energiebereich von etwa 100 Elektronvolt statt, für den jedoch bis jetzt noch keine dezidierte Methode zur zuverlässigen Kalibrierung der Detektoren existiert. Das Ziel der CRAB Kollaboration ist es, mittels einer neuartigen Methode erstmals eine Kalibrierungsoption für diesen relevanten Energiebereich zu entwickeln. Dabei spielen Neutronen eine zentrale Rolle.

Als Forschungsreaktor mit kleiner Leistung eignet sich der TRIGA Mark II Reaktor der TU Wien am Atominstitut nur wenig für Standardmethoden der Neutronenstreuung. Hierfür sind Experimente an Hochflussreaktoren wie dem **ILL in Grenoble erforderlich** und die österreichische Mitgliedschaft an diesem Forschungsinstitut **essentiell**. Für die erste Entwicklung neuer Methoden sowie für das Heranführen junger wissenschaftlicher Mitarbeiter an den Stand der Neutronenforschung ist aber eine Neutronenquelle wie der Forschungsreaktor am Atominstitut unverzichtbar. Im Fall der CRAB Methode erweist sich sogar der im Vergleich geringe Neutronenfluss in den Strahlrohren der Neutronenquelle als Vorteil, da die Wechselwirkungsrate der kryogenen Detektoren mit den Neutronen nicht groß werden darf, was sich aus

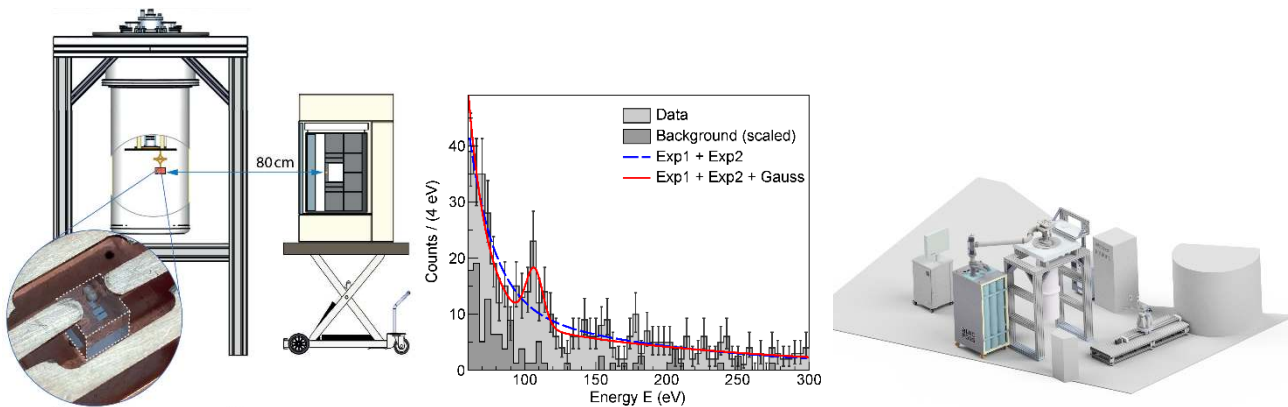
dem Zeitverhalten der Kristalle erklärt. Diese Zeilen verstehen sich damit auch als ein Plädoyer für ein fruchtbares Nebeneinander von kleinen lokalen Forschungsneutronenquellen und internationalen Zentren mit Hochflussneutronenstrahlen.

Kalibrierung von CaWO_4 – Die hocheffiziente Neutrinodetektion durch NUCLEUS

Das der CRAB Methode zugrunde liegende Prinzip basiert auf der (n,γ) Neutroneneinfangreaktion des Detektorkristalls, bei der die Atomkerne des Kristalls durch das Einfangen thermischer Neutronen in einen angeregten Zustand gebracht werden. Um wieder einen stabilen Energiezustand zu erreichen, sendet der Kern Gammastrahlung im MeV Bereich aus, wobei es aufgrund der Impulserhaltung zu einem Rückstoß des Kerns kommt. Diese Rückstoßenergie liegt in der Größenordnung von etwa 100 eV und führt durch die Anregung von Phononen zu einer Erhöhung der Kristalltemperatur, die mittels supraleitender Transition Edge Sensoren (TES) gemessen werden kann. Aus dem daraus erhaltenen Detektorsignal wird schließlich das Spektrum der im Kristall deponierten Energie rekonstruiert. Nachdem die zu erwartende Rückstoßenergie als Folge des Neutroneneinfangs sehr genau berechnet werden kann, liefert der Vergleich des gemessenen Spektrums mit der theoretischen Vorhersage die Möglichkeit zur Kalibrierung des Detektors.

Zur Umsetzung der Kalibrierungsmethode wurde die internationale CRAB Kollaboration ins Leben gerufen. Das CRAB Projekt entwickelt sich dabei in enger Kooperation mit der NUCLEUS Kollaboration, die CEvNS mit Hilfe von Reaktor-Neutrinos untersuchen wird und für die eine zuverlässige Kalibrierung der verwendeten kryogenen Detektoren von großer Relevanz ist.

Im Jahr 2022 gelang der CRAB Kollaboration ein bedeutender Meilenstein in Form der weltweit ersten Beobachtung einer Kernrückstoßenergie-Linie im 100 eV Energiebereich ([1] und Abbildung links und Mitte). Bei dieser an der TU München durchgeführten Messung diente ein mit einem TES bestückter CaWO_4 Kristall, wie er bei NUCLEUS verwendet wird, als Target für Neutronen einer ^{252}Cf Labor-Neutronenquelle. Dieser Erfolg stellt einen wichtigen Proof-of-concept für CRAB dar.



Links: Aufbau des Experiments an der TU München mit einer Californium-Laborneutronenquelle; Mitte: Rückstoßlinie der Wolfram-Atome nach Neutronenabsorption und Gamma-Emission im Energiespektrum des Detektors; rechts: Impression der geplanten Anlage am TRIGA Mark II Reaktor des Atominstutts der TU Wien.

Das nächste große Ziel ist nun die Übersiedlung und der Aufbau des Experiments am Forschungsreaktor des Atominstutts (Abbildung rechts). Die Wahl des Standorts ist durch die Eigenschaften dieser Neutronenquelle motiviert, durch die ein genügend hoher, einfach kontrollierbarer und hintergrundarmer thermischer Neutronenstrahl zur Verfügung gestellt werden kann. Diese besonderen Eigenschaften bieten grundlegende Vorteile gegenüber der Verwendung der bisher eingesetzten ^{252}Cf Neutronenquelle.

Dadurch können künftig Messungen mit höherer Statistik, geringerem Hintergrund, verbesserter Präzision und geringeren Unsicherheiten durchgeführt werden, wodurch langfristig der Weg für die Kalibrierung weiterer kryogener Detektoren aus unterschiedlichen Materialien für diverse Experimente internationaler Forschungsgruppen geebnet werden soll.

Related publication:

[1] **CRAB Collaboration, NUCLEUS Collaboration, H. Abele et al., Phys. Rev. Lett. 130, 211802 (2023).**

Suche nach dunklen Kräften mit ultrakalten Neutronen (René Sedmik, Abele group, Techn. Univ. Wien)

Ultrakalte (sehr langsame) Neutronen haben keine elektrische Ladung und sind daher im Gegensatz zu anderen Teilchen oder Atomen immun gegen eine der größten experimentellen Störungen - elektrische Felder. Zudem sind sie makroskopische Quantenobjekte und können von Oberflächen reflektiert werden. Daher sind sie nahezu perfekte Testobjekte, um nach Abweichungen von Newtons Gravitationsgesetz (sogenannte fünfte Kräfte) zu suchen. Letztere werden von einer Vielzahl von Theorien vorhergesagt und könnten eine Erklärung für dunkle Materie und Energie liefern, welche zusammen immerhin 95% unseres Universums ausmachen [1].

In der qBounce Kollaboration konnten wir über die vergangenen 14 Jahre erfolgreich ultrakalte Neutronen einsetzen, um die möglichen Parameter fünfter Kräfte zu beschränken [2–5]. Dazu nutzen wir spektroskopische Methoden, mit welchen man die Energiezustände ultrakalter Neutronen im Gravitationsfeld der Erde genau vermessen kann. Innerhalb der letzten ILL-Vertragsperiode gelang es uns, unsere Technik auf die präziseste bekannte Methode (Ramsey-Spektroskopie) zu erweitern, womit sich die Sensitivität unseres Instruments um fast eine Größenordnung verbessern ließ. Nach einer erfolgreichen ersten Demonstration 2019 [6] wurden Fehler reduziert und eine Reihe von Messungen durchgeführt. Die Resultate führten zu neuen Limiten auf Symmetron [4] und Dilatonfelder [5], welche eine Erklärung für dunkle Energie darstellen könnten.

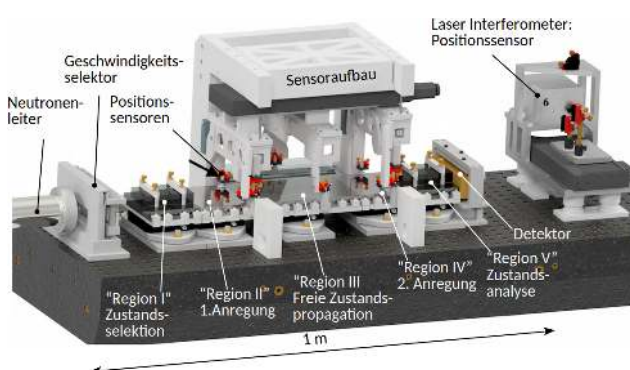


Figure 1: Schematische Darstellung des Ramsey qBounce Experiments mit seinen 5 Regionen.

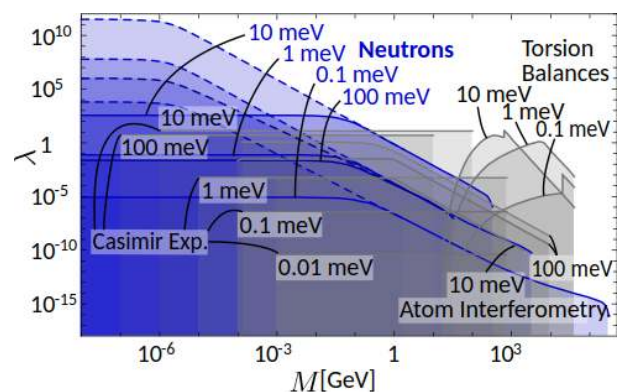


Figure 2: Schnitt durch den ausgeschlossenen Parameterraum für Symmetron-kräfte, welche eine Erklärung für dunkle Energie darstellen könnten Details:[1].

In unserem Experiment ist ein dichter Fluss ultrakalter Neutronen, wie er **derzeit nur am ILL Grenoble verfügbar ist essentiell**. Dies begründet sich daraus, dass die Neutronen nach Position und Geschwindigkeit selektiert werden müssen, wobei nur etwa eines von 10 Mio Teilchen übrig bleibt. Diese Neutronen werden

dann über mechanische Anregung aus dem Anfangszustand in eine quantenmechanische Überlagerung aus zwei Gravitationszuständen gebracht. Nach einer freien Flugstrecke, über welche man noch elektrische oder magnetische Felder anlegen kann, wird die Anregung in den Zielzustand vervollständigt. Gemessen wird schlussendlich die Rate (respektive Übergangswahrscheinlichkeit) der Neutronen im Zielzustand als Funktion der Energie (Frequenz). Aus den erhaltenen Daten können die Energiezustände der Neutronen präzise abgeleitet werden. Entsprechen sie jenen, die man aus der Theorie erwartet, kann man daraus ableiten, dass zusätzliche fünfte Kräfte nur unterhalb der experimentellen Ungenauigkeit existieren können. Fände man jedoch eine Abweichung, hätte man eine neue Kraft entdeckt.

Ein Beispiel für eine solche Untersuchung stellen unsere Arbeiten zu Symmetron- und Dilatonfeldern dar. Diese haben drei Parameter, wodurch hier nur Schnitte durch den dreidimensionalen ausgeschlossene Bereich gezeigt werden können. Für beide Theorien konnten wir die ausgeschlossenen Bereiche um mehrere Größenordnungen erweitern.

Um Gewissheit zu erlangen, ob diese Modelle tatsächlich dunkle Energie beschreiben können oder nicht, müssen die Parameter aber noch deutlich stärker beschränkt werden. Dazu haben wir ein Projekt im Rahmen der Quantum Austria Initiative des FFG gestartet, welches unsere Methode durch neue Quantentechnologien noch weiter verbessern, und Messungen mit 1000-facher Sensitivität ermöglichen soll. Dieses Programm hängt **kritisch von der Verfügbarkeit der ultrakalten Neutronenquelle am ILL** ab und könnte ohne diese nur sehr schwer durchgeführt werden.

Related publications

- [1] S. Sponar *et al.*, Nat. Rev. Phys. **3**, 309 (2021).
- [2] T. Jenke *et al.*, Phys. Rev. Lett. **112**, 151105 (2014).
- [3] G. Cronenberg *et al.*, Nat. Phys. **14**, 1022 (2018).
- [4] T. Jenke *et al.*, Eur. Phys. J. Spec. Top. **230**, 1131 (2021).
- [5] H. Fischer *et al.*, (2023).
- [6] R. I. P. Sedmik *et al.*, EPJ Web Conf. **219**, 05004 (2019).

Decoherence-free entropic gravity: Model and experimental tests

Erik Verlinde's theory of entropic gravity [E. Verlinde, J. High Energy Phys. 04 (2011) 029], postulating that gravity is not a fundamental force but rather emerges thermodynamically, has garnered much attention as a possible resolution to the quantum gravity problem. Some have ruled this theory out on grounds that entropic forces are by nature noisy and entropic gravity would therefore display far more decoherence than is observed in ultracold neutron experiments. We address this criticism by modeling linear gravity acting on small objects as an open quantum system. In the strong coupling limit, when the model's unitless free parameter σ goes to infinity, the entropic master equation recovers conservative gravity. We show that the proposed master equation is fully compatible with the qBOUNCE experiment for ultracold neutrons as long as $\sigma > 250$ at 90% confidence. Furthermore, the entropic master equation predicts energy increase and decoherence on long time scales and for large masses, phenomena that tabletop experiments could test. In addition, comparing entropic gravity's energy increase to that of the Diósi-Penrose model for gravity-induced decoherence indicates that the two theories are incompatible. These findings support the theory of entropic gravity, motivating future experimental and theoretical research [7,8].

Related publications

- [7] A. Schimmoller *et al.*, Phys. Rev. Research **3**, 033065 (2021).
- [8] Eric J. Sung *et al.*, [arXiv.2307.00170](https://arxiv.org/abs/2307.00170):

4 Geowissenschaften

Neutron Crystallography of Mineral-Based Structures

Zusammenfassung der Aktivitäten

Neutronenstreuexperimente sind für das Verhalten bestimmter Geomaterialien unerlässlich bezüglich geophysikalischer oder geochemischer Informationen. Besonders die magnetischen Eigenschaften, aber auch das Verständnis rund um die Geochemie leichter Elemente sind die zentralen Fragenstellungen in der modernen Geomaterialforschung. Neutronen werden nicht nur an den Atomkernen gestreut, sondern wegen ihres magnetischen Moments wechselwirken sie auch mit den ungepaarten Hüllenelektronen, sodass das Beugungsbild dann nicht nur von der chemischen, sondern auch von der magnetischen Ordnung der Struktur bestimmt ist. Da die Streulängen unabhängig von der Kernladungszahl vergleichbar groß sind, können deshalb auch leichte Atome wie Wasserstoff, Lithium oder Beryllium erhebliche Anteile zur Beugungsintensität beitragen und bei der Strukturanalyse lokalisiert werden. Das **ILL bietet auch einzigartige Messaufbauten**, in denen in-situ Experimente an verhältnismäßig kleinen Proben bzw. mitunter auch Messserien mit besonders hoher Zeitauflösung durchgeführt werden können, besonders hinsichtlich Anwendungen zur planetaren Forschung bzw. aktueller energierelevanter Geomaterialforschung.

Selected scientific examples (Redhammer group)

Extending pyroxene phase diagrams by magnetic transformations.

Pyroxene are not only one of the major constituents of the Earth's crust and mantle, but resemble materials of both a rich crystal chemistry and a diverse magnetochemistry. As complex magnetic systems, pyroxenes have generated lively interest in solid-state physics due to their fascinating low-dimensional magnetic properties, in addition being multiferroic in many cases. In a series of experimental studies using neutron diffraction complex magnetic structures have been investigated, such as in the system (Na,Li)FeGe₂O₆.

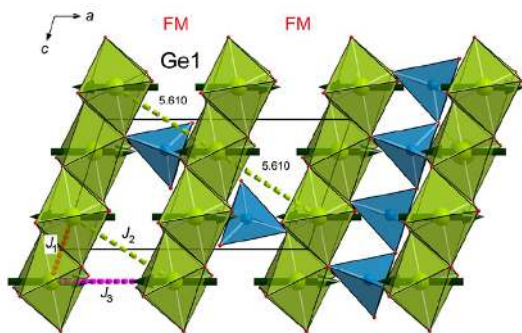


Figure 1a. Collinear magnetic spin structure of the C2/c Li_{0.18}Na_{0.82}FeGe₂O₆ clinopyroxene with various inter-chain couplings.

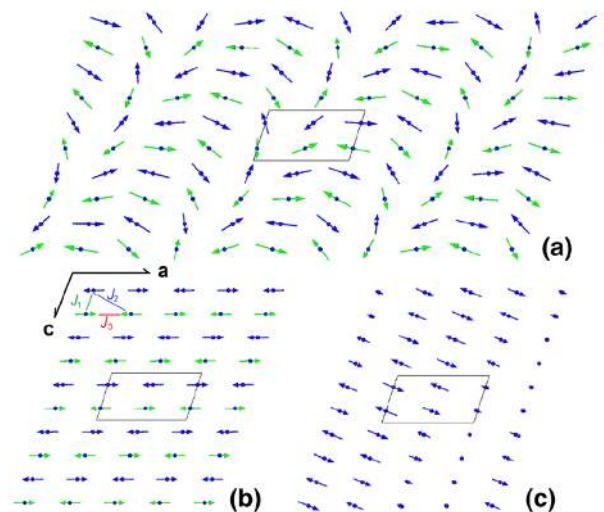


Figure 1b. Magnetic structures in C2/c Li_{0.12}Na_{0.88}FeGe₂O₆ in a cycloidal form at 4K (a), a simple collinear form at 4K (b), and a spin-density wave structure at 12.5 K (c).

Lithium localization and diffusion pathways in garnet-based solid electrolytes.

The replacement of liquid electrolytes with solids is a very current research topic in the development of safe and efficient Li-ion batteries. Mineral structures like those of garnets show excellent properties in terms of stability and ion conductivity. As part of extensive neutron diffraction studies, it was possible to

show that in garnet-based materials of the type $\text{Li}_7\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ there exist a 3-dimensional tunnel-like network within the framework of LaO_8 and ZrO_6 polyhedra (Figure 2). Neutron diffraction reveals that these Li positions are only partially occupied and thus enable extraordinarily high mobility of the Li ions through fast diffusion.

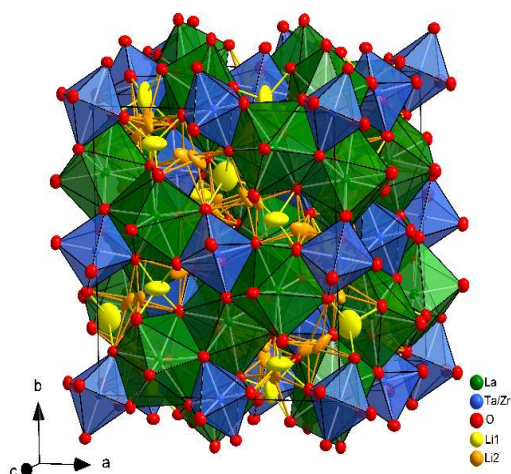


Figure 2a. Polyhedral representation of the crystal structure of $\text{La}_6\text{La}_3\text{ZrTaO}_{12}$ at 300 K, as determined from neutron diffraction data. Anisotropic displacement parameters are shown at the 95% probability level.

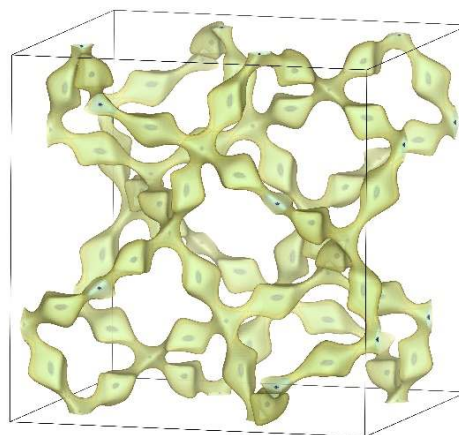


Figure 2b. Bond valence - energy map (0.1 eV (dark blue) and 0.5 eV (yellow) beyond the average minimum). The contour lines display the connectivities towards a 3-dimensional network for an enhanced mobility of Li atoms. Experimentally determined Li positions correspond to the calculated minima.

Related publications

- [1] D. Rettenwander, A. Welzl, L. Cheng, J. Fleig, M. Musso, E. Suard, M.M. Doeff, G.J. Redhammer, G. Amthauer. *Inorganic Chemistry* **54**, 10440 – 10449 (2015)
- [2] R. Wagner, G.J. Redhammer, D. Rettenwander, A. Senyshyn, W. Schmidt, M. Wilkening, G. Amthauer. *Chemistry of Materials* **28**, 1861 – 1871 (2016)
- [3] D. Rettenwander, G.J. Redhammer, F. Preishuber-Pflügl, L. Cheng, L. Miara, R. Wagner, A. Welzl, E. Suard, M.M. Doeff, M. Wilkening, J. Fleig, G. Amthauer. *Chemistry of Materials* **28**, 2384 – 2392 (2016)
- [4] G.J. Redhammer, A. Senyshyn, S. Lebernegg, G. Tippelt, E. Dachs, G. Roth. *Physics and Chemistry of Minerals* **44**, 669-684 (2017)
- [5] G.J. Redhammer, M. Meven, S. Ganschow, G. Tippelt, D. Rettenwander. *Acta Crystallographica* **B77**, 123-130 (2020)

Techn. Univ. Wien - TRIGA MARK-II REACTOR

The TRIGA-reactor at the Atominstitut (Techn. Univ. Wien) is a research reactor of the swimming-pool type that is used for training, research and isotope production (Training, Research, Isotope Production, General Atomics = TRIGA). Throughout the world there are more than 35 TRIGA-reactors in operation, Europe alone accounting for 8 of them.

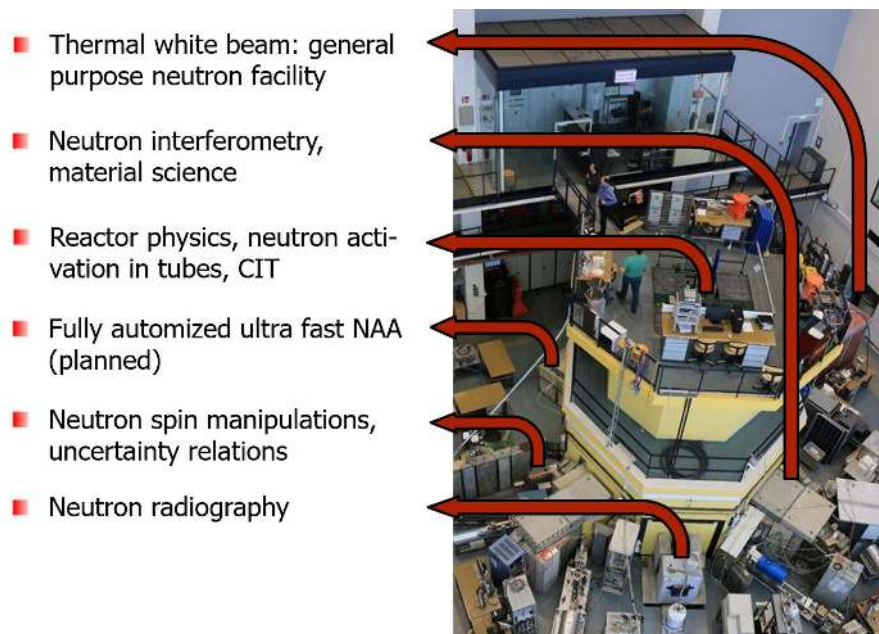
The TRIGA-reactor Vienna has a maximum continuous power output of 250 kW (thermal). The reactor core consists of 83 fuel elements. At nominal power, the center fuel temperature is about 200°C. Because of the low reactor power level, the burn-up of the fuel is very small and most of the fuel elements loaded into the core in 2012 are still in use.

The main moderator is zirconium-hydride and has the design-property of moderating less efficiently at high temperatures. Next to making the TRIGA-reactor Vienna inherently safe, operation in a pulsed mode (with a rapid power rise to 250 MW for roughly 40 milliseconds) is possible. The power rise is accompanied by an increase in the maximum neutron flux density from $1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (at 250 kW) to $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (at 250 MW).

The reactor is controlled by three control rods, which contain boron carbide as absorber material. If the absorber rods are withdrawn from the core the number of fissions in the core and the power level increases. The start-up process takes roughly five minutes for the reactor to reach a power level of 250 kW from the sub-critical state.

The TRIGA Mark-II is equipped with a number of irradiation devices such as irradiation tubes at a neutron flux density of $10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, beam extraction tubes and pneumatic transfer systems or the neutron radiography facility. The four beam tubes permit extraction of neutron beams of all energies into the reactor hall to deliver neutrons for the experiments.

The image below shows the location of the corresponding installations:



Appendix: List of Q1-publications¹³ (high impact; ILL data base 2019 – 08/2023)

- [1] Dubbers D., Saul H., Märkisch B., Soldner T., Abele H.: *Exotic decay channels are not the cause of the neutron lifetime anomaly*. Physics Letters B **791**, 6-10 (2019)
doi: [10.1016/j.physletb.2019.02.013](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2019.02.013)
- [2] Edkins K., McIntyre G.J., Wilkinson C., Kahlenberg V., Többs D., Griesser U.J., Brüning J., Schmidt M.U., Steed J.W.: *Extensive sequential polymorphic interconversion in the solid state: Two hydrates and ten anhydrous phases of hexamidine diisethionate*. Crystal Growth & Design **19**, 7280-7289 (2019)
doi: [10.1021/acs.cgd.9b01170](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01170)
- [3] Flauger P., Ellabban M.A., Glavan G., Klepp J., Pruner C., Jenke T., Geltenbort P., Fally M.: *Light- and neutron-optical properties of holographic transmission gratings from polymer-ionic liquid composites with submicron grating spacing*. Polymers **11**, 1459-1-11 (2019)
doi: [10.3390/polym11091459](https://doi.org/10.3390/polym11091459)
- [4] Ivanov A.N., Wellenzohn M., Abele H.: *Probing of violation of Lorentz invariance by ultracold neutrons in the Standard Model Extension*. Physics Letters B **797**, 134819-1 – 9 (2019)
doi: [10.1016/j.physletb.2019.134819](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2019.134819)
- [5] Katcho N.A., Carrete J., Reynaud M., Rousse G., Casas-Cabanas M., Mingo N., Rodríguez-Carvajal J., Carrasco J.: *An investigation of the structural properties of Li and Na fast ion conductors using high-throughput bond-valence calculations and machine learning*. Journal of Applied Crystallography **52**, 148 – 157 (2019)
doi: [10.1107/S1600576718018484](https://doi.org/10.1107/S1600576718018484)
- [6] Klopff M., Jericha E., Märkisch B., Saul H., Soldner T., Abele H.: *Constraints on the dark matter interpretation $n \rightarrow \chi + e^+ e^-$ of the neutron decay anomaly with the PERKEO II experiment*. Physical Review Letters **122**, 222503-1 – 4 (2019)
doi: [10.1103/PhysRevLett.122.222503](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.222503)
- [7] Lassenberger A., Scheberl A., Batchu K.C., Cristiglio V., Grillo I., Hermida-Merino D., Reimhult E., Baccile N.: *Biocompatible glyconanoparticles by grafting sophorolipid monolayers on monodispersed iron oxide nanoparticles*. ACS Applied Bio Materials **2**, 3095-3107 (2019)
doi: [10.1021/acsabm.9b00427](https://doi.org/10.1021/acsabm.9b00427)
- [8] Märkisch B., Mest H., Saul H., Wang X., Abele H., Dubbers D., Klopff M., Petoukhov A., Roick C., Soldner T., Werder D.: *Measurement of the weak axial-vector coupling constant in the decay of free neutrons using a pulsed cold neutron beam*. Physical Review Letters **122**, 242501-1 – 7 (2019)
doi: [10.1103/PhysRevLett.122.242501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.242501)
- [9] Portnichenko P.Y., Nikitin S.E., Prokofiev A., Paschen S., Mignot J.M., Ollivier J., Podlesnyak A., Meng S., Lu Z., Inosov D.S.: *Evolution of the propagation vector of antiferroquadrupolar phases in $\text{Ce}_3\text{Pd}_2\text{OSi}_6$ under magnetic field*. Physical Review B **99**, 214431-1 – 10 (2019)
doi: [10.1103/PhysRevB.99.214431](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.214431)
- [10] Ramakrishnan M., Constable E., Cano A., Mostovoy M., White J.S., Gurung N., Schierle E., de Brion S., Colin C.V., Gay F., Lejay P., Ressouche E., Weschke E., Scagnoli V., Ballou R., Simonet V., Staub U.: *Field-induced double spin spiral in a frustrated chiral magnet*. npj Quantum Materials **4**, 60-1 – 7 (2019)
doi: [10.1038/s41535-019-0199-3](https://doi.org/10.1038/s41535-019-0199-3)
- [11] Reimhult E., Schroffenegger M., Lassenberger A.: *Design principles for thermoresponsive core-shell nanoparticles: Controlling thermal transitions by brush morphology*. Langmuir **35**, 7092-7104 (2019)
doi: [10.1021/acs.langmuir.9b00665](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b00665)

¹³ Q1 indicates the first quartile within a certain subject, e.g. „Condensed Matter Physics“, „Nuclear and High Energy Physics“, „General Physics and Astronomy“ etc. as ranked by the Scopus Source database (run by Elsevier). This is a measure of quality/success used also in „Leistungsvereinbarungen“ between BMBWF and universities.

- [12] Thater J.C., Stubenrauch C., Glatter O., Klemmer H., Sottmann T.: *Microstructure of ionic liquid (EAN)-rich and oil-rich microemulsions studied by SANS*. Physical Chemistry Chemical Physics **21**, 160-170 (2019)
doi: [10.1039/C8CP06228E](https://doi.org/10.1039/C8CP06228E)
- [13] Waldie S., Moulin M., Porcar L., Pichler H., Strohmeier G.A., Skoda M., Forsyth V.T., Haertlein M., Maric S., Cárdenas M.: *The production of matchout-deuterated cholesterol and the study of bilayer-cholesterol interactions*. Scientific Reports **9**, 5118-1 – 11 (2019)
doi: [10.1038/s41598-019-41439-z](https://doi.org/10.1038/s41598-019-41439-z)
- [14] Beck M., Ayala Guardia F., Borg M., Kahlenberg J., Muñoz Horta R., Schmidt C., Wunderle A., Heil W., Maisonne R., Simson M., Soldner T., Virot R., Zimmer O., Klopff M., Konrad G., Baesler S., Glück F., Schmidt U.: *Improved determination of the $\beta-\bar{\nu}_e$ angular correlation coefficient a in free neutron decay with the aSPECT spectrometer*, Physical Review C **101**, 055506-1 – 35 (2020)
doi: [10.1103/PhysRevC.101.055506](https://doi.org/10.1103/PhysRevC.101.055506)
- [15] Danner A., Demirel B., Kersten W., Lemmel H., Wagner R., Sponar S., Hasegawa Y.: *Spin-rotation coupling observed in neutron interferometry*. npj Quantum Information **6**, 23-1 – 6 (2020)
doi: [10.1038/s41534-020-0254-8](https://doi.org/10.1038/s41534-020-0254-8)
- [16] C. Guerrero et al. (n_TOF Collaboration): *Neutron capture on the s-process branching point ^{171}Yb via time-of-flight and activation*, Physical Review Letters **125**, 142701-1 – 8 (2020)
doi: [10.1103/PhysRevLett.125.142701](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.142701)
- [17] Jericha E., Gösselsberger C., Abele H., Baumgartner S., Berger B.M., Geltenbort P., Hino M., Oda T., Raab R., Badurek G.: *MONOPOL - A traveling-wave magnetic neutron spin resonator for tailoring polarized neutron beams*. Scientific Reports **10**, 5815-1 – 12 (2020)
doi: [10.1038/s41598-020-62612-9](https://doi.org/10.1038/s41598-020-62612-9)
- [18] Lamura G., Onuorah I.J., Bonfà P., Sanna S., Shermadini Z., Khasanov R., Orain J.C., Baines C., Gastaldo F., Giovannini M., Čurlík I., Dzubinska A., Pristas G., Reiffers M., Martinelli A., Ritter C., Joseph B., Bauer E., De Renzi R., Shiroka T.: *Pressure-induced antiferromagnetic dome in the heavy-fermion $\text{Yb}_2\text{Pd}_2\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x$ system*. Physical Review B **101**, 054410-1 – 14 (2020)
doi: [10.1103/PhysRevB.101.054410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.054410)
- [19] Nesvizhevsky V.V., Nez F., Vasiliev S.A., Widmann E., Crivelli P., Reynaud S., Voronin A.Y.: *A magneto-gravitational trap for studies of gravitational quantum states*. European Physical Journal C **80**, 520-1–10 (2020)
doi: [10.1140/epjc/s10052-020-8088-2](https://doi.org/10.1140/epjc/s10052-020-8088-2)
- [20] Parnell S.R., Van Well A.A., Plomp J., Dalgliesh R.M., Steinke N.J., Cooper J.F.K., Geerits N., Steffen K.E., Snow W.M., de Haan V.O.: *Search for exotic spin-dependent couplings of the neutron with matter using spin-echo based neutron interferometry*. Physical Review D **101**, 122002-1–9, (2020)
doi: [10.1103/PhysRevD.101.122002](https://doi.org/10.1103/PhysRevD.101.122002)
- [21] Saul H., Roick C., Abele H., Mest H., Klopff M., Petukhov A.K., Soldner T., Wang X., Werder D., Märkisch B.: *Limit on the Fierz interference term b from a measurement of the beta asymmetry in neutron decay*. Physical Review Letters **125**, 112501-1–7 (2020)
doi: [10.1103/PhysRevLett.125.112501](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.112501)
- [22] Tomita Y., Kageyama A., Iso Y., Umemoto K., Kume A., Liu M., Pruner C., Jenke T., Rocca S., Geltenbort P., Fally M., Klepp J.: *Fabrication of nanodiamond-dispersed composite holographic gratings and their light and slow-neutron diffraction properties*. Physical Review Applied **14**, 044056-1–15 (2020)
doi: [10.1103/PhysRevApplied.14.044056](https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.14.044056)
- [23] Vorauer T., Kumar P., Berhaut C.L., Chamasemani F.F., Jouneau P.H., Aradilla D., Tardif S., Pouget S., Fuchsichler B., Helfen L., Atalay S., Widanage W.D., Koller S., Lyonard S., Brunner R.: *Multi-scale quantification and modeling of aged nanostructured silicon-based composite anodes*. Communications Chemistry **3**, 141-1–11 (2020)
doi: [10.1038/s42004-020-00386-x](https://doi.org/10.1038/s42004-020-00386-x)
- [24] Waldie S., Sebastiani F., Browning K., Maric S., Lind T.K., Yepuri N., Darwish T.A., Moulin M., Strohmeier G., Pichler H., Skoda M.W.A., Maestro A., Haertlein M., Forsyth V.T., Bengtsson E., Malmsten M., Cárdenas M.: *Lipoprotein ability to exchange and remove lipids from model*

membranes as a function of fatty acid saturation and presence of cholesterol. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids **1865**, 158769-1-8 (2020)
doi: [10.1016/j.bbalip.2020.158769](https://doi.org/10.1016/j.bbalip.2020.158769)

- [25] Borah K., Mendum T.A., Hawkins N.D., Ward J.L., Beale M.H., Larrouy-Maumus G., Bhatt A., Moulin M., Haertlein M., Strohmeier G., Pichler H., Forsyth V.T., Noack S., Goulding C.W., McFadden J., Beste D.J.V.: *Metabolic fluxes for nutritional flexibility of Mycobacterium tuberculosis*. Molecular Systems Biology **17**, e10280-1 – 16 (2021)
doi: [10.15252/msb.202110280](https://doi.org/10.15252/msb.202110280)
- [26] Cisse A., Schachner-Nedherer A.L., Appel M., Beck C., Ollivier J., Leitinger G., Prassl R., Kornmueller K., Peters J.: *Dynamics of apolipoprotein B-100 in interaction with detergent probed by incoherent neutron scattering*. Journal of Physical Chemistry Letters **12**, 12402-12410 (2021)
doi: [10.1021/acs.jpclett.1c03141](https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c03141)
- [27] Correa Y., Waldie S., Thépaut M., Micciulla S., Moulin M., Fieschi F., Pichler H., Forsyth V.T., Haertlein M., Cárdenas M.: *SARS-CoV-2 spike protein removes lipids from model membranes and interferes with the capacity of high density lipoprotein to exchange lipids*. Journal of Colloid and Interface Science **602**, 732-739 (2021)
doi: [10.1016/j.jcis.2021.06.056](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2021.06.056)
- [28] Farkas D.G., Szaller D., Kézsmárki I., Nagel U., Room T., Peedu L., Viirik J., White J.S., Cubitt R., Ito T., Fishman R.S., Bordács S.: *Selection rules and dynamic magnetoelectric effect of the spin waves in multiferroic BiFeO₃*, Physical Review B **104**, 174429-1 – 12 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevB.104.174429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.174429)
- [29] Frewein M.P.K., Doktorova M., Heberle F.A., Scott H.L., Semeraro E.F., Porcar L., Pabst G.: *Structure and interdigitation of chain-asymmetric phosphatidylcholines and milk sphingomyelin in the fluid phase*. Symmetry **13**, 1441-1 – 25 (2021)
doi: [10.3390/sym13081441](https://doi.org/10.3390/sym13081441)
- [30] Godfrin H., Beauvois K., Sultan A., Krotscheck E., Dawidowski J., Fåk B., Ollivier J.: *Dispersion relation of Landau elementary excitations and thermodynamic properties of superfluid ⁴He*. Physical Review B **103**, 104516-1 – 33 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevB.103.104516](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.104516)
- [31] Guarini E., Barocchi F., De Francesco A., Formisano F., Laloni A., Bafle U., Celli M., Colognesi D., Magli R., Cunsolo A., Neumann M.: *Collective dynamics of liquid deuterium: Neutron scattering and approximate quantum simulation methods* Physical Review B **104**, 174204-1 – 20 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevB.104.174204](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.174204)
- [32] Ivanov A.N., Wellenzohn M., Abele H.: *Quantum gravitational states of ultracold neutrons as a tool for probing of beyond-Riemann gravity*. Physics Letters B **822**, 136640-1 – 7 (2021)
doi: [10.1016/j.physletb.2021.136640](https://doi.org/10.1016/j.physletb.2021.136640)
- [33] Li H., Mars J., Lohstroh W., Koza M.M., Butt H.J., Mezger M.: *Water mobility in the interfacial liquid layer of ice/clay nanocomposites*. Angewandte Chemie International Edition **60**, 7697-7702 (2021)
doi: [10.1002/anie.202013125](https://doi.org/10.1002/anie.202013125)
- [34] Rehal R., Barker R.D., Lu Z., Bui T.T., Demé B., Hause G., Wölk C., Harvey R.D.: *Lipid domain formation and non-lamellar structures associated with varied lysylphosphatidylglycerol analogue content in a model Staphylococcal plasma membrane*. Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes **1863**, 183571-1 – 13 (2021)
doi: [10.1016/j.bbamem.2021.183571](https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2021.183571)
- [35] Sawada D., Nishiyama Y., Roder T., Porcar L., Zahra H., Trogen M., Sixta H., Hummel M.: *Process-dependent nanostructures of regenerated cellulose fibres revealed by small angle neutron scattering*. Polymer **218**, 123510-1 – 10 (2021)
doi: [10.1016/j.polymer.2021.123510](https://doi.org/10.1016/j.polymer.2021.123510)
- [36] Schimmoller A.J., McCaul G., Abele H., Bondar D.I.: *Decoherence-free entropic gravity: Model and experimental tests*. Physical Review Research **3**, 033065-1 – 11 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevResearch.3.033065](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.033065)

- [37] Sebastiani F., Yanez Arteta M., Lerche M., Porcar L., Lang C., Bragg R.A., Elmore C.S., Krishnamurthy V.R., Russell R.A., Darwish T., Pichler H., Waldie S., Moulin M., Haertlein M., Forsyth V.T., Lindfors L., Cárdenas M.: *Apolipoprotein E binding drives structural and compositional rearrangement of mRNA-containing lipid nanoparticles*. ACS Nano **15**, 6709-6722 (2021)
doi: [10.1021/acsnano.0c10064](https://doi.org/10.1021/acsnano.0c10064)
- [38] Semeraro E.F., Marx L., Mandl J., Frewein M.P.K., Scott H.L., Prévost S., Bergler H., Lohner K., Pabst G.: *Evolution of the analytical scattering model of live Escherichia coli*. Journal of Applied Crystallography **54**, 473-485 (2021)
doi: [10.1107/S1600576721000169](https://doi.org/10.1107/S1600576721000169)
- [39] Sponar S., Sedmik R.I.P., Pitschmann M., Abele H., Hasegawa Y.: *Tests of fundamental quantum mechanics and dark interactions with low-energy neutrons*. Nature Reviews Physics **3**, 309-327 (2021)
doi: [10.1038/s42254-021-00298-2](https://doi.org/10.1038/s42254-021-00298-2)
- [40] Tamtögl A., Bahn E., Sacchi M., Zhu J., Ward D.J., Jardine A.P., Jenkins S.J., Fouquet P., Ellis J., Allison W.: *Motion of water monomers reveals a kinetic barrier to ice nucleation on graphene*. Nature Communications **12**, 3120-1 – 8 (2021)
doi: [10.1038/s41467-021-23226-5](https://doi.org/10.1038/s41467-021-23226-5)
- [41] Trainer C., Songvilay M., Qureshi N., Stunault A., Yim C.M., Rodriguez E.E., Heil C., Tsurkan V., Green M.A., Loidl A., Wahl P., Stock C.: *Magnetic surface reconstruction in the van der Waals antiferromagnet $Fe_{1+x}Te$* . Physical Review B **103**, 024406-1 – 20 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevB.103.024406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.024406)
- [42] Wagner R., Kersten W., Danner A., Lemmel H., Pan A.K., Sponar S.: *Direct experimental test of commutation relation via imaginary weak value*. Physical Review Research **3**, 023243-1 – 7 (2021)
doi: [10.1103/PhysRevResearch.3.023243](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.023243)
- [43] Waldie S., Sebastiani F., Moulin M., Del Giudice R., Paracini N., Roosen-Runge F., Gerelli Y., Prévost S., Voss J.C., Darwish T.A., Yepuri N., Pichler H., Maric S., Forsyth V.T., Haertlein M., Cárdenas M.: *ApoE and ApoE nascent-like HDL particles at model cellular membranes: Effect of protein isoform and membrane composition*. Frontiers in Chemistry **9**, 630152-1 – 15 (2021)
doi: [10.3389/fchem.2021.630152](https://doi.org/10.3389/fchem.2021.630152)
- [44] Wieser V., Mears L.L.E., Barker R.D., Chen H.W., Valtiner M.: *Hydration forces dominate surface charge dependent lipid bilayer interactions under physiological conditions*. Journal of Physical Chemistry Letters **12**, 9248-9252 (2021)
doi: [10.1021/acs.jpclett.1c02572](https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.1c02572)
- [45] Lemmel H., Geerits N., Danner A., Hofmann H.F., Sponar S.: *Quantifying the presence of a neutron in the paths of an interferometer*. Physical Review Research **4**, 023075-1 – 10 (2022)
doi: [10.1103/PhysRevResearch.4.023075](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.4.023075)
- [46] Lemmel H., Jentschel M., Abele H., Lafont F., Guérard B., Sasso C.P., Mana G., Massa E.: *Neutron interference from a split-crystal interferometer*. Journal of Applied Crystallography **55**, 870-875 (2022)
doi: [10.1107/S1600576722006082](https://doi.org/10.1107/S1600576722006082)
- [47] Maier P., Xavier Jr. N.F., Truscott C.L., Hansen T., Fouquet P., Sacchi M., Tamtögl A.: *How does tuning the van der Waals bonding strength affect adsorbate structure?* Physical Chemistry Chemical Physics **24**, 29371-29380 (2022)
doi: [10.1039/D2CP03468A](https://doi.org/10.1039/D2CP03468A)
- [48] Mazza F., Portnichenko P.Y., Avdoshenko S., Steffens P., Boehm M., Choi E.S., Nikolo M., Yan X., Prokofiev A., Paschen S., Inosov D.S.: *Cascade of magnetic-field-driven quantum phase transitions in $Ce_3Pd_2OSi_6$* . Physical Review B **105**, 174429-1 – 11 (2022)
doi: [10.1103/PhysRevB.105.174429](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174429)
- [49] Michel L., Ludescher L., Cristiglio V., Charlaix E., Paris O., Picard C.: *Bowtie-shaped deformation isotherm of superhydrophobic cylindrical mesopores*. Langmuir **38**, 211-220 (2022)
doi: [10.1021/acs.langmuir.1c02427](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c02427)
- [50] Prehal C., von Mentlen J.M., Drvaric Talian S., Vizintin A., Dominko R., Amenitsch H., Porcar L., Freunberger S.A., Wood V.: *On the nanoscale structural evolution of solid discharge products in*

- lithium-sulfur batteries using operando scattering*. Nature Communications **13**, 6326-1 – 13 (2022)
doi: [10.1038/s41467-022-33931-4](https://doi.org/10.1038/s41467-022-33931-4)
- [51] Semeraro E.F., Marx L., Mandl J., Letofsky-Papst I., Mayrhofer C., Frewein M.P.K., Scott H.L., Prévost S., Bergler H., Lohner K., Pabst G.: *Lactoferricins impair the cytosolic membrane of Escherichia coli within a few seconds and accumulate inside the cell*. elife **11**, e72850-1 – 29 (2022)
doi: [10.7554/eLife.72850](https://doi.org/10.7554/eLife.72850)
- [52] Vaillard A.S., El Haitami A., Dreier L.B., Fontaine P., Cousin F., Gutfreund P., Goldmann M., Backus E.H.G., Cantin S.: *Vertically heterogeneous 2D semi-interpenetrating networks based on cellulose acetate and cross-linked polybutadiene*. Langmuir **38**, 2538-2549 (2022)
doi: [10.1021/acs.langmuir.1c03084](https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c03084)
- [53] Yamashita K., Komatsu K., Klotz S., Fabelo O., Fernández-Díaz M.T., Abe J., Machida S., Hattori T., Irifune T., Shinmei T., Sugiyama K., Kawamata T., Kagi H.: *Atomic distribution and local structure ice VII from in situ neutron diffraction*. Proceedings of the National Academy of Sciences **119**, e2208717119-1-6 (2022)
doi: [10.1073/pnas.2208717119](https://doi.org/10.1073/pnas.2208717119)
- [54] Abele H. et al.: *Particle physics at the European Spallation Source*. Physics Reports **1023**, Jan-84 (2023)
doi: [10.1016/j.physrep.2023.06.001](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2023.06.001)
- [55] Andersen A.B.A., Christiansen R.T., Holm-Janass S., Manvell A.S., Pedersen K.S., Sheptyakov D., Embs J.P., Jacobsen H., Dachs E., Vaara J., Lefmann K., Nielsen U.G.: *The magnetic properties of $\text{MAI}_4(\text{OH})_{12}\text{SO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ with $\text{M} = \text{Co}^{2+}$, Ni^{2+} , and Cu^{2+} determined by a combined experimental and computational approach*. Physical Chemistry Chemical Physics **25**, 3309-3322 (2023)
doi: [10.1039/D2CP05362D](https://doi.org/10.1039/D2CP05362D)
- [56] Chatterjee D., Puphal P., Barthelemy Q., Willwater J., Süllow S., Baines C., Petit S., Ressouche E., Ollivier J., Zoch K.M., Krellner C., Parzer M., Riss A., Garmroudi F., Pustogow A., Mendels P., Kermarrec E., Bert F.: *From spin liquid to magnetic ordering in the anisotropic Kagome Y-Kapellasite $\text{Y}_3\text{Cu}_9(\text{OH})_{19}\text{Cl}_8$: A single-crystal study*. Physical Review B **107**, 125156-1–13 (2023)
doi: [10.1103/PhysRevB.107.125156](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.125156)
- [57] Cisse A., Desfosses A., Stainer S., Kandiah E., Traore D.A.K., Bezault A., Schachner-Nedherer A.L., Leitinger G., Hoerl G., Hinterdorfer P., Gutsche I., Prassl R., Peters J., Kornmueller K.: *Targeting structural flexibility in low density lipoprotein by integrating cryo-electron microscopy and high-speed atomic force microscopy*. International Journal of Biological Macromolecules **252**, 126345-1–14 (2023)
doi: [10.1016/j.ijbiomac.2023.126345](https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.126345)
- [58] Correa Y., Del Giudice R., Waldie S., Thépaut M., Micciula S., Gerelli Y., Moulin M., Delaunay C., Fieschi F., Pichler H., Haertlein M., Forsyth V.T., Le Brun A., Moir M., Russell R.A., Darwish T., Brinck J., Wodaje T., Jansen M., Martin C., Roosen - Runge F., Cárdenas M.: *High-Density Lipoprotein function is modulated by the SARS-CoV-2 spike protein in a lipid-type dependent manner*. Journal of Colloid and Interface Science **645**, 627-638 (2023)
doi: [10.1016/j.jcis.2023.04.137](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2023.04.137)
- [59] Corucci G., Batchu K.C., Luchini A., Santamaria A., Frewein M.P.K., Laux V., Haertlein M., Yamaryo-Botté Y., Botté C.Y., Sheridan T., Tully M., Maestro A., Martel A., Porcar L., Fragneto G.: *Developing advanced models of biological membranes with hydrogenous and deuterated natural glycerophospholipid mixtures*. Journal of Colloid and Interface Science **645**, 870-881 (2023)
doi: [10.1016/j.jcis.2023.04.135](https://doi.org/10.1016/j.jcis.2023.04.135)
- [60] Geerits N., Lemmel H., Berger A.S., Sponar S.: *Phase vortex lattices in neutron interferometry*, Communications Physics **6**, 209-1 – 9 (2023)
doi: [10.1038/s42005-023-01318-6](https://doi.org/10.1038/s42005-023-01318-6)
- [61] Guarini E., Bafle U., Colognesi D., Cunsolo A., De Francesco A., Formisano F., Montfrooij W., Neumann M., Barocchi F.: *Role of the single-particle dynamics in the transverse current autocorrelation function of a liquid metal*. Journal of Chemical Physics **158**, 234501-1–9 (2023)
doi: [10.1063/5.0152090](https://doi.org/10.1063/5.0152090)

- [62] Guarini E., Neumann M., De Francesco A., Formisano F., Cunsolo A., Montfrooij W., Colognesi D., Bafile U.: *Onset of collective excitations in the transverse dynamics of simple fluids*. Physical Review E **107**, 014139-1-8 (2023)
doi: [10.1103/PhysRevE.107.014139](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.014139)
- [63] Kelley E.G., Frewein M.P.K., Czakkel O., Nagao M.: *Nanoscale bending dynamics in mixed-chain lipid membranes*. Symmetry **15**, 191-1 – 12 (2023)
doi: [10.3390/sym15010191](https://doi.org/10.3390/sym15010191)
- [64] Killian C., Burkley Z., Blumer P., Crivelli P., Gustafsson F.P., Hanski O., Nanda A., Nez F., Nesvizhevsky V., Reynaud S., Schreiner K., Simon M., Vasiliev S., Widmann E., Yzombard P.: *GRASIAN: Towards the first demonstration of gravitational quantum states of atoms with a cryogenic hydrogen beam*. European Physical Journal D **77**, 50-1 – 10 (2023)
doi: [10.1140/epjd/s10053-023-00634-4](https://doi.org/10.1140/epjd/s10053-023-00634-4)
- [65] Kraemer S., Moens J., Athanasakis-Kaklamanakis M., Bara S., Beeks K., Chhetri P., Chrysalidis K., Claessens A., Cocolios T.E., Correia J.G.M., Witte H., Ferrer R., Geldhof S., Heinke R., Hosseini N., Huyse M., Köster U., Kudryavtsev Y., Laatiaoui M., Lica R., Magchiels G., Manea V., Merckling C., Pereira L.M.C., Raeder S., Schumm T., Sels S., Thirolf P.G., Tunhuma S., Van den Bergh P., Van Duppen P., Vantomme A., Verlinde M., Villarreal R., Wahl U.: *Observation of the radiative decay of the ^{229}Th nuclear clock isomer*. Nature **617**, 706-710 (2023)
doi: [10.1038/s41586-023-05894-z](https://doi.org/10.1038/s41586-023-05894-z)
- [66] Popcevic P., Batistic I., Smontara A., Velebit K., Jacimovic J., Zivkovic I., Tsyrlin N., Piatek J., Berger H., Sidorenko A., Ronnow H., Forró L., Barisic N., Tutis E.: *Electronic transport and magnetism in the alternating stack of metallic and highly frustrated magnetic layers in $\text{Co}_{1/3}\text{NbS}_2$* . Physical Review B **107**, 235149-1 – 16 (2023)
doi: [10.1103/PhysRevB.107.235149](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.235149)
- [67] Trummer F., Lade O., Glatter O., Sottmann T., Stubenrauch C.: *Microemulsions supported by octyl monoglucoside and geraniol. 3. Microstructure & general pattern*. Colloids and Surfaces A **676**, 132133-1 – 10 (2023)
doi: [10.1016/j.colsurfa.2023.132133](https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2023.132133)
- [68] Wagner R., Kersten W., Lemmel H., Sponar S., Hasegawa Y.: *Quantum causality emerging in a delayed-choice quantum Cheshire Cat experiment with neutrons*. Scientific Reports **13**, 3865-1 – 13 (2023)
doi: [10.1038/s41598-023-29970-6](https://doi.org/10.1038/s41598-023-29970-6)

