



# MBI Interner Newsletter



5. Jahrgang - Ausgabe 16 - November 2014

## Inhalte

Editorial

Personalinformationen / Preise

Betriebsrat

Forschungsergebnisse/Research Highlights

Projekteinwerbung

Allgemeines

EDV/IT

Liebe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter,

gegenwärtig verändern sich die Rahmenbedingungen für die Forschung in Deutschland in grundlegender Weise, eine Entwicklung von der auch das MBI profitieren wird. Der Bundestag hat vor kurzem eine Änderung des Grundgesetzes (§91b) beschlossen, durch welche die Kooperationsmöglichkeiten von Bund und Ländern bei der Finanzierung der Hochschulen und Forschungseinrichtungen erweitert werden sollen. Parallel zu dieser Entwicklung wurde von der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz eine Fortschreibung des Hochschulpakts und des Pakts für Forschung und Innovation bis zum Jahr 2020 beschlossen. Während der Hochschulpakt den finanziellen Spielraum der Universitäten erweitert, sichert der Pakt für Forschung den außeruniversitären Forschungseinrichtungen einen jährlichen Zuwachs des Etats um 3%. Davon werden im Land Berlin 0.7% direkt in den Haushalt 2016 und 1.5% in die nachfolgenden Haushalte der Leibniz-Institute eingestellt. Darüber hinaus erhöht sich die Programmpauschale der ab 2016 eingeworbenen DFG-Projekte auf 22% der Projektmittel. Trotz der begrenzten Höhe dieser Zuwächse tragen beide Maßnahmen dazu bei, die stetig steigenden Betriebs- und Unterhaltskosten des MBI zu finanzieren.

Ebenso wichtig für das MBI ist die Gewinnung hochqualifizierter Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter. Seit Anfang Oktober 2014 besteht die neue Nachwuchsgruppe Biomolekulare Dynamik, die Benjamin Fingerhut im hochkompetitiven Emmy-Noether-Programm des DFG eingeworben hat. Die Forschungsthemen der Gruppe werden in diesem Newsletter vorgestellt. Das Besetzungsverfahren für die Direktorenstelle im Bereich B hat gute Fortschritte gemacht, die Berufungskommission hat Anfang November eine Berufsliste verabschiedet, die jetzt in den Gremien des Forschungsverbundes und der TU Berlin zu bestätigen ist. Darüber hinaus läuft mit der TU Berlin ein Verfahren für eine gemeinsame Berufung im Bereich der Theoretischen Physik. Hier werden Anfang Dezember die Vorstellungsvorträge der Kandidatinnen und Kandidaten stattfinden.

Das Jahr 2014 ist für das MBI bisher recht erfolgreich verlaufen, auch wenn wir den Publikationsrekord des Vorjahres wahrscheinlich nicht einstellen werden. Ich möchte Ihnen allen für Ihren Einsatz und Ihre engagierte Mitarbeit danken und eine schöne Advents- und Weihnachtszeit wünschen.

Für das Direktorium:  
Thomas Elsässer

Dear Members of the MBI,

The legal framework of research in Germany is presently undergoing fundamental changes, a development from which MBI will benefit. Very recently, the German Parliament, the Bundestag, has passed a change of the German constitution (Grundgesetz, §91b) which paves the way for new forms of cooperation between the Federal Government and the States of Germany to finance universities and research institutions. In parallel, the Joint Science Conference (GWK) has decided to continue the Pact for Universities and the Pact for Research and Innovation until 2020. While the first improves the financial scope for universities, the second secures an annual 3% budget increase for non-university research institutions. The Leibniz institutes in Berlin will receive a rise of their institutional budget of 0.7% in 2016 and of 1.5% in the following years. Moreover, the overhead budget of DFG projects acquired from 2016 on will increase to 22% of the granted support for research. Though limited, such additional funds will help to cover the ever increasing running and maintenance costs of MBI.

Attracting highly qualified new members of staff represents an equally important issue for MBI. Since early October 2014, there is the new junior research group Biomolecular Dynamics led by Benjamin Fingerhut who acquired his funding through the highly competitive Emmy-Noether-Program of DFG. The research topics of this group are being presented in this newsletter. The search procedure for the new director of Division B has made substantial progress. In early November, the search committee has passed a list of candidates which is now in the process of approval by the different boards of the Forschungsverbund and the TU Berlin. There is a second procedure for a joint appointment with TU Berlin, a professor position in theoretical physics. Here, the candidates will present their work in early December 2014.

So far, the year 2014 has been quite successful for MBI though we may not top our 2013 publication record. I would like to thank you all for your most dedicated work and collaboration and wish you a nice Advent and Christmas season.

For the Board of Directors:  
Thomas Elsaesser



# MBI Interner Newsletter



5. Jahrgang - Ausgabe 16 - November 2014

## Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts  
(Stand 18.11.2014)

Dr. Martin Richter  
Wissenschaftler C1  
Tel. 1413  
E-Mail: richter@mbi-berlin.de  
Beginn 01.11.2014



Michael Pankow  
Betriebstechnik  
Tel. 1528  
E-Mail: pankow@mbi-berlin.de  
Beginn 01.09.2014



Andrey Boyko  
Gastwissenschaftler A3  
Tel. 1288  
E-Mail: boyko@mbi-berlin.de  
Beginn 01.10.2014



Robin Wehner  
stud. & wiss. Hilfskraft C2  
Tel. 1454  
E-Mail: wehner@mbi-berlin.de  
Beginn 01.10.2014



Tamás Firkala  
Gastwissenschaftler C2  
Tel. 1454  
E-Mail: firkala@mbi-berlin.de  
Beginn 13.10.2014



Dr. Philip Kristensen  
Gastwissenschaftler A1  
Tel. n.n.  
E-Mail: kristens@mbi-berlin.de  
Beginn 01.11.2014



Ausgeschiedene:  
(Stand 18.11.2014)

Aidan Rafferty  
Diplomand C1  
Tel. 1454  
E-Mail: rafferty@mbi-berlin.de  
Beginn 01.09.2014



Dr. Sergei Kühn  
Dr. Andrea Lübcke  
Dr. Bernd Schütte  
David Casas  
Ralph Ewers  
Prof. Dr. Sergej Popruzhenko  
Dr. Rogelio Rodriguez-Oliveros  
Bastian Borchers  
Christian Greve  
Teodora Grigороva  
Drew Morrill  
Anna Santagostino  
Paul Weber  
Frank Fischer  
Stephan Scholz  
Vahdet Vural

Wissenschaftler, C3  
Wissenschaftlerin A2  
Wissenschaftler A2  
Gastwissenschaftler B1  
Techniker B2/ Betriebsrat  
Gastwissenschaftler A1  
Gastwissenschaftler A1  
Doktorand C2  
Doktorand C1  
Doktorandin A3  
Doktorand C3  
Doktorandin A3  
Doktorand A2  
Techniker  
stud./wiss. Hilfskraft B3  
stud./wiss. Hilfskraft A2

Uwe Müller  
Netzwerk-Unix-Administrator  
Tel. 1542  
E-Mail: umueller@mbi-berlin.de  
Beginn 01.10.2014





## Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/ Master- & Diplomarbeiten

### Sandra Höhm

Dynamik der Erzeugung und Mechanismen der Entstehung von periodischen Oberflächenstrukturen im Nanometerbereich (LIPSS) durch die Bestrahlung von Festkörpern mit Femtosekunden-Laserpulsen

Dissertation (2014) - Technische Universität Berlin

### Thomas Kunze

Dynamik elektronischer Strukturen an nanostrukturierten Oberflächen

Dissertation (2014) - Freie Universität Berlin

### Christian Seim

Laboratory full-field transmission X-ray microscopy and applications in life science

Dissertation (2014) - Technische Universität Berlin

### Christian Greve

Ultrafast vibrational dynamics of nucleobases and base pairs in solution and DNA oligomers

Dissertation (2014) - Humboldt Universität Berlin

### Bastian Borchers

Untersuchungen mit phasenstabilisierten Laserimpulsen

Dissertation (2014) - Humboldt Universität Berlin

### René Costard

Ultrafast Dynamics of Phospholipid-Water Interfaces Studied by Nonlinear Time-Resolved Vibrational Spectroscopy

Dissertation (2014) - Humboldt Universität Berlin

### Marcel Herzlieb

Erzeugung von laserinduzierten periodischen Oberflächenstrukturen mittels Femtosekunden-Doppelpulsen zweier verschiedener Wellenlängen

Masterarbeit (2014) - Technische Hochschule Wildau

### Stephan Marschner

Erzeugung, Kontrolle und Charakterisierung von großflächigen periodischen Oberflächenstrukturen im Nanometerbereich für tribologische Anwendungen

Masterarbeit (2014) - Technische Hochschule Wildau

### Johan Hummert

Characterization of ultrashort laser pulses for transient absorption spectroscopy

Masterarbeit (2014) - Humboldt Universität Berlin

### Paul Frömel

Generation of few-cycle laser pulses by hollow-core fiber compression for high harmonic generation

Masterarbeit (2014) - Technische Universität Berlin

### Jannick Weisshaupt

Generation of femtosecond x-ray pulses with a mid-IR OPCPA system

Masterarbeit (2014) - Humboldt Universität Berlin

## Projekteinwerbungen

### Bereich A

#### Projektbezeichnung: Impulsfonds-2014 WGL

Prämie für Beantragung eines ERC 2014 Starting Grant

**Laufzeit:** 01.01.2014 - 31.03.2014

**Projektleiter:** J.A. Mikosch

**Geldgeber:** Leibniz-Gemeinschaft

### Bereich C

#### Projektbezeichnung: DFG WO 558/13-2

Ultraschnelle Umverteilung elektronischer Ladung in ionischen Kristallen mittels Femtosekunden-Röntgenbeugung

**Laufzeit:** 01.10.2014 - 30.09.2017

**Projektleiter:** M. Wörner

**Geldgeber:**DFG

# MBI Interner Newsletter

5. Jahrgang - Ausgabe 16 - November 2014

## Betriebsrat

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

Anfang September fand das MBI-Sommerfest statt. Aus unserer Sicht war es eine rundum gelungene Veranstaltung, die reichlich Gelegenheit bot, mit den Kolleginnen und Kollegen des Instituts in ungezwungener Atmosphäre ins Gespräch zu kommen. Herzlichen Dank an alle, die einen Beitrag zur Organisation, Vorbereitung und Durchführung des Sommerfestes geleistet haben!

**Am Montag, dem 1. Dezember 2014 um 10:00 Uhr** findet die jährliche, gemeinsame Betriebs- und Institutsversammlung des MBI im Max-Born-Saal statt. Der Betriebsrat lädt Sie herzlich dazu ein. Fester Bestandteil der Tagesordnung wird der Jahresbericht über unsere Tätigkeit sein. Gerne greifen wir Ihre weiteren Wünsche und Anregungen auf, über welche weiteren Themen berichtet werden soll, welche Probleme Ihnen unter den Nägeln brennen und wo es Anlass zu Lob und Tadel gibt. Bitte scheuen Sie sich nicht, Kontakt mit uns aufzunehmen.

Unsere Kontaktdaten und weiterführende Informationen finden Sie auf der Intranet-Site:

<http://intern.mbi-berlin.de/de/more/betriebsrat/index.html>

Viele Grüße, Ihr Betriebsrat

## Works Council

Dear colleagues,

At the beginning of September our traditional barbecue took place. We all had a good time with plenty of opportunities to talk to each other in a relaxed atmosphere. Last but not least a big thank you to all those who were helping!

As usual the regular MBI Works Assembly Meeting as well as the Institute's Meeting are taking place on **Monday, 1 December 2014 at 10:00 a.m.** at the Max Born Lecture Hall. You are cordially invited to attend both meetings. An integral part of the agenda is the annual report of our activities. Please approach us with your ideas and wishes and let us know what topics should be addressed in order to discuss pros and cons at this occasion.

We will be happy to discuss it and please feel free to contact us any time.

For more information refer to our intranet site:

<http://intern.mbi-berlin.de/de/more/betriebsrat/index.html>

Kind regards, Your Works Council

## Sommerfest / Barbecue 2014 Impressions





## Forschungsergebnisse

### Bin ich da, bin ich weg ...

Neue Experimente mit Heliumatomen ermöglichen es, die Elektronenkorrelation beliebig ein- und auszuschalten

Abgesehen vom Wasserstoffatom, das nur aus einem Proton und einem Elektron besteht, ist das Heliumatom das am einfachsten aufgebaute Atom unserer Welt. Das Heliumatom besteht aus einem doppelt geladenen Kern und zwei ihn umkreisenden Elektronen. Die Existenz von zwei Elektronen führt zu einem neuen Gesichtspunkt mit weitreichenden Konsequenzen, nämlich dem Konzept der Elektronenkorrelation. In einer Veröffentlichung im Fachjournal Physical Review Letters [1] wird von der experimentellen Beobachtung des kontrollierten Auftauchens von Elektronenkorrelation in Heliumatomen berichtet. Photoionisation von Helium wurde untersucht unter Bedingungen, bei denen die Elektronenkorrelation beliebig ein- und ausgeschaltet werden kann. Für ausgeschaltete Korrelation verhält sich Helium wie ein Wasserstoffatom. Für eingeschaltete Korrelation hingegen wird die Dynamik des Ionisationsprozesses stark durch die Wechselwirkung zwischen den beiden Elektronen bestimmt.

Im Experiment wurden Heliumatome durch die Absorption eines einzelnen Photons im ultravioletten Spektralbereich ionisiert. Dies war möglich, weil die Atome durch Stöße mit energiereichen Elektronen in einer Entladungsquelle in einen langlebigen angeregten Zustand gebracht wurden. Die Energie des anregenden Photons wurde so eingestellt, dass sie gerade zur Ionisation des Atoms ausreichte. Damit wurden 99,9% der Photonenenergie zu Überwindung der Bindungsenergie des Elektrons aufgewendet und nur 0,1% an das nach der Ionisation befreite Elektron als Bewegungsenergie abgegeben. Die entstehenden Photoelektronen waren damit sehr langsam. Im Experiment wurden sie auf einen zweidimensionalen Detektor beschleunigt, wo ihre Auftrefforte gemessen wurden. Die Auftrefforte bilden die Geschwindigkeiten der Elektronen in der Detektorebene ab.

Wie eindrucksvoll in dem berühmten Doppelspaltexperiment zur Interferenz einzelner Elektronen demonstriert, das in einer Abstimmung von "Physicsworld" vor einigen Jahren zum "Allerschönsten Physik-Experiment" gekürt wurde, haben Elektronen sowohl Teilchen- als auch Wellencharakter. Dafür verantwortlich ist die Quantenmechanik. Die Welleneigenschaften von Materie werden durch eine nach dem französischen Physiker de Broglie benannten Wellenlänge beschrieben, die jedem sich bewegenden Teilchen zugewiesen werden kann. Je niedriger die kinetische Energie des Elektrons ist, desto größer wird die de Broglie Wellenlänge. Ist die Energie des Elektrons nur klein genug, wird die de Broglie Wellenlänge in der makro-

## Research Highlights

### Now you see me, now you don't ...

New experiments in the helium atom allow to turn electron correlation on and off at will

After the hydrogen atom, which consists of one proton and one electron, the helium atom is nature's simplest atom. The helium atom consists of a doubly-charged nucleus surrounded by two electrons. The presence of two electrons in the atom introduces a novel aspect with profound consequences, namely the concept of electron correlation. In a paper published in Physical Review Letters [1], experiments are reported where the onset of electron correlation in the helium atom is observed. Photoionization of helium is studied under conditions where the electron correlation can be turned on or off at will. When turned off, the helium atom behaves just like a hydrogen atom; when turned on, the helium dynamics is strongly affected by the interaction between the two electrons.

In the experiment, helium atoms were ionized by the absorption of a single ultra-violet photon. This was possible because, prior to the experiment, the helium atoms were excited into a long-living excited state, by means of a collision with an energetic electron in a discharge source. The energy of the ultra-violet light was tuned in such a manner that it was only just sufficient for ionization of the atom, with 99.9% of the photon energy being used to overcome the ionization potential of the atom, and just 0.1% of the photon energy being converted into photoelectron kinetic energy. The very slow photoelectrons were accelerated towards a two-dimensional detector, where their position was measured. This position is then a measure of the velocity of the electron in the plane of the detector.

As clearly shown in the famous double-slit experiment on interference of single electrons (voted "the most beautiful physics experiment", in a poll conducted by Physicsworld about a decade ago) electrons exhibit both particle- and wave-like behavior. The wave-like behavior derives from the de Broglie wavelength that quantum mechanics associates with any moving particle. The lower the kinetic energy of the electron, the larger the de Broglie wavelength is. Correspondingly, for low enough kinetic energies, the de Broglie wavelength becomes observable on macroscopic length scales. In the helium photoionization experiment the wave-like nature of the slow electrons leads to the observation of a series of interference rings, with constructive and destructive interferences alternating on the detector (see Figure).

All this was already known from experiments performed by our team in the last decade. In fact, these experiments had revealed the existence of two distinct origins for the observed



skopischen Welt beobachtbar. In den Photoionisations-Experimenten führt die Wellennatur der langsamen Elektronen zur Beobachtung einer Reihe von Interferenzringen, wobei konstruktive und destruktive Interferenzen sich auf dem Detektor abwechseln (siehe Abbildung).

Dieses Interferenzphänomen ist durch Experimente unseres Teams in den letzten Jahren immer genauer vermessen worden. In der Tat haben unsere vorherigen Experimente die Existenz von zwei verschiedenen Mechanismen für die Entstehung der Interferenzen zu Tage gefördert. In Experimenten mit Wasserstoffatomen wurde gezeigt, dass die Interferenzen mit der Knotenstruktur der Wellenfunktion zusammenhängen kann, die durch Photoabsorption im Atom angeregt wurde. In Experimenten mit größeren Atomen mit vielen Elektronen, wie etwa den genau vermessenen Xenonatomen, wurde gezeigt, dass die Interferenzen auch das Resultat von Unterschieden in der Länge möglicher Wege des Elektrons zum Detektor sein können. Salopp gesagt: Zwei Wege, die sich um eine ganzzahlige Anzahl von de Broglie Wellenlängen unterscheiden, werden zu konstruktiver Interferenz, zwei Wege, die sich um eine halbzahlige Anzahl von de Broglie Wellenlängen unterscheiden, werden zu destruktiver Interferenz führen.

Wie nun in der aktuellen Studie gezeigt, treten bei Heliumatomen beide Mechanismen auf. Interessanterweise reicht eine kleine Änderung ( $\ll 1\%$ ) in der Stärke eines angelegten, äußeren elektrischen Feldes aus, um das beobachtete Interferenzmuster zu verändern. Wie sich zeigt, lassen sich damit "wasserstoffähnliche" Heliumatome, bei denen die Knotenstruktur der Wellenfunktion das Interferenzmuster bestimmt, in „xenonartige“ Heliumatome überführen, bei denen die auftauchende Elektronenkorrelation die „wasserstoffähnliche“ Wellenfunktion zerstört.

Auf diese Weise wird das Heliumatom zu einem wunderbaren Nano-Labor für das kontrollierte Ein- und Ausschalten der Elektronenkorrelation.

Kontakt: Marc Vrakking, Tel. 1200

interferences. In experiments on hydrogen atoms published last year [2], it was shown that the interferences could be connected to the nodal patterns of the wavefunctions excited in the atom upon absorption of a photon. In other atoms, such as the extensively studied xenon atom, it was shown that the interferences could arise as a result of differences in the lengths of possible paths of the electron on the way to the detector. Crudely speaking, two paths differing by an integral number of de Broglie wavelengths will interfere constructively, whereas two paths differing by a half-integer number of de Broglie wavelengths interfere destructively.

In helium, both situations have now been observed to coexist. Moreover, it was observed that the helium dynamics can be controlled by tiny changes ( $\ll 1\%$ ) in the strength of the external electric field. This suffices to convert an atom that reveals the nodal pattern of its wavefunction in a hydrogen-like manner, into an atom where electron correlation removes the observability of this nodal pattern, and where the observed interference patterns are completely determined by pathlength differences between the atom and the detector.

In this manner, the helium atom constitutes a wonderful nanoscale laboratory for the onset of electron correlation.

Original Publication: A.S. Stodolna, F. Lépine, T. Bergeman, F. Robicheaux, A. Gijsbertsen, J.H. Jungmann, C. Bordas, M.J.J. Vrakking  
*Visualizing the Coupling between Red and Blue Stark States Using Photoionization Microscopy*

Physical Review Letters 113.103002, (2014)

<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.113.103002>

1. Stodolna, A.S., et al., Visualizing the coupling between red and blue Stark states using photoionization microscopy. Physical Review Letters, 2014. 113. 103002.

2. Stodolna, A.S., et al., Hydrogen Atoms under Magnification: Direct Observation of the Nodal Structure of Stark States. Physical Review Letters, 2013. 110(21): p. 213001.

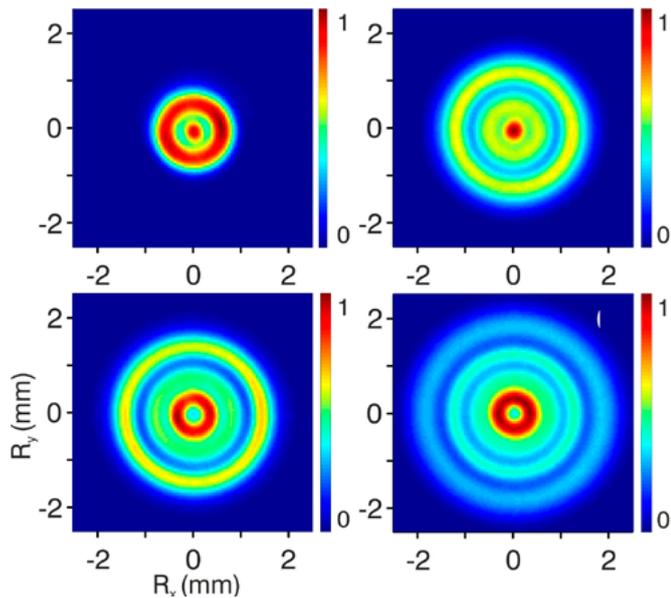


Abbildung:

Ionisation von Heliumatomen, aufgenommen mit einem bildgebenden Detektor. Interferenzringe werden beobachtet, die die Knotenstruktur der angeregten elektronischen Wellenfunktion wiedergeben, oder aber alternativ solche, die von Wegunterschieden zum Detektor herrühren. Im ersteren Falle zeigt Helium das Verhalten von Wasserstoffatomen, bei dem Elektronenkorrelation keine Rolle spielt. Im zweiten Fall wird die Ionisation stark von der Elektronenkorrelation bestimmt.

Figure:

Sample images recorded for ionization of helium atoms. Interference patterns are measured that reveal the nodal structure of the electronic wavefunction that is excited, or that result from path length differences. In the former case helium behaves like a hydrogen atom, and electron correlation does not play a role, whereas in the latter case the ionization is strongly influenced by electron correlation.



## Forschungsergebnisse

### Wasser lässt die Ripple schrumpfen

Moderne Technologie und industrielle Anwendungen erzeugen eine steigende Nachfrage nach nanostrukturierten Oberflächen und ihrer Funktionalisierung mit einfachen Bearbeitungsstrategien und mit immer kleineren Strukturgrößen.

Ein vielversprechender Weg basiert auf den laserinduzierten periodischen Oberflächenstrukturen (englisch LIPSS oder Ripple), die in einem einstufigen Verfahren bei Bestrahlung von Festkörpern auf der Basis linear polarisierter Laserpulse erzeugt werden. LIPSS wurden erstmals von Birnbaum 1965 bei der Bestrahlung von Germaniumoberflächen mit gepulster Rubinlaserstrahlung beobachtet. Für stark absorbierende Materialien, wie Metalle oder Halbleiter weisen die Oberflächenstrukturen in der Regel Perioden nahe der Laserwellenlänge auf. Typischerweise werden sie als *low-spatial frequency LIPSS (LSFL)* bezeichnet.

LIPSS mit Perioden kleiner als die Hälfte der Laserwellenlänge werden als *high-spatial frequency LIPSS (englisch HSFL)* bezeichnet. Sie werden überwiegend nach der Bestrahlung von Dielektrika oder Halbleitern mit ultrakurzen Laserpulsen von fs- bis ps-Zeiten beobachtet.

Eine andere Möglichkeit die LIPSS-Perioden signifikant zu reduzieren, ist ein Wechsel zu einer flüssigen Bearbeitungsumgebung. Es wurde der Umgebungseinfluss (Luft vs. Wasser) auf die LIPSS-Erzeugung an dem technologisch relevanten Material Silizium untersucht. Ein erweitertes plasmonisches Dünnschicht-Modell wird vorgestellt, das die Probenumgebung berücksichtigt und die LSFL-Theorie für die Bestrahlung von Silizium in Luft adaptiert und quantitativ die für die Bearbeitung in Wasser beobachteten stark reduzierten LIPSS-Perioden erklärt.

Standard einkristalline Siliziumscheiben wurden als Halbleitermaterial verwendet: n-dotiert, (111) -orientiert, einseitig poliert, 400  $\mu\text{m}$  dick.

Die Proben wurden mit mehreren (N) Femtosekunden-Laserpulsen entweder in Luft oder in destilliertem Wasser bestrahlt. Für die Untersuchungen wurde eine mit Wasser gefüllte Küvette mit einem optischen Eintrittsfenster aus Quarzglas ( $\text{a-SiO}_2$ ) verwendet. Bei Bestrahlung in Luft wurde die Küvette entfernt, und die Probe wurde direkt bestrahlt.

Ein Chirped-Pulse Ti:Saphir-Laser-Verstärker-System wurde zur Erzeugung linear polarisierter Laserpulse von 30 fs (790 nm) bei Pulsfolgefrequenzen zwischen 1 Hz (Bearbeitung in Wasser) und 1 kHz (Bearbeitung in Luft) verwendet.

Die Laserpulse wurden mit einem sphärischen dielektrischen Spiegel ( $f = 500 \text{ mm}$ ) fokussiert und die Proben wurden vor dem geometrischen Fokus platziert, um nichtlineare optische Effekte in Luft oder Wasser zu vermeiden. An der Probenoberfläche betrug der Gauß'sche Strahlradius  $w_0$  ( $1/e^2$ ) 140  $\mu\text{m}$ .

## Research Highlights

### Water shrinks ripple size

Modern technology and industrial applications generate an increasing demand of surface nano-structuring and functionalization with simple processing strategies and for reduced structural sizes.

One promising way is based on laser-induced periodic surface structures (LIPSS), which are formed in a single-step process upon irradiation of solids by linearly polarized laser pulses. LIPSS have been observed first by Birnbaum in 1965 after irradiation of Germanium surfaces by pulsed ruby laser radiation. For strong absorbing materials such as metals or semiconductors, the surface structures usually have spatial periods close to the laser wavelength. Typically, they are referred to as *low-spatial frequency LIPSS (LSFL)*.

LIPSS with periods smaller than half of the laser wavelength are called *high-spatial frequency LIPSS (HSFL)*. They are observed predominantly after the irradiation of dielectrics or semiconductors with ultra-short laser pulses of fs- to ps-duration.

Another way to significantly reduce the LIPSS periods is a change to a liquid processing environment. We have investigated the environmental influence (air vs. water) on LIPSS formed on the technologically relevant material silicon. An extended plasmonic thin-film model was presented which includes the sample environment, seamlessly adapts the LSFL theory for irradiation of silicon in air and quantitatively explains the strongly reduced LIPSS periods observed for processing in water.

The samples were irradiated by multiple (N) femtosecond laser pulses either in air or in distilled water environment. For the experiment we used a water-filled cell with an optical entrance window (fused silica,  $\text{a-SiO}_2$ ). For irradiation in air, the liquid containing cell was removed and the sample was exposed to the beam directly.

A chirped pulse Ti:sapphire laser amplifier system was used to generate linearly polarized laser pulses of 30 fs duration (790 nm center wavelength) at pulse repetition frequencies between 1 Hz (processing in water) and 1 kHz (processing in air). The laser pulses were focused by a spherical dielectric mirror ( $f=500\text{mm}$  focal length) and the samples were placed in front of the geometrical focus position in order to reduce nonlinear optical effects in air or water environment. At the sample surface, Gaussian beam radii  $w_0$  ( $1/e^2$ ) of 140  $\mu\text{m}$  were obtained.

As a result *Fig. 1* compares the fs-laser processing of silicon surfaces in air [(a) + (c)] and in water environment [(b)+(d)] for a fixed number of  $N=100$  laser pulses per spot [fluence in air:  $\Phi = 0.17 \text{ J/cm}^2$ , in water:  $\Phi = 0.09 \text{ J/cm}^2$ ]. The fluence was individually optimized for each environment, resulting in the most pronounced LIPSS.

The upper row of *Fig. 1* shows SEM images of surface regions near the center of the irradiation spot, while the lower row pro-



Als Resultat wird in **Abb. 1** die fs-Laserbearbeitung von Siliziumoberflächen in Luft [(a) + (c)] und in Wasser [(b) + (d)] für eine feste Anzahl von  $N = 100$  Laserpulsen pro Spot [Fluenz in der Luft:  $\Phi = 0,17 \text{ J/cm}^2$ , in Wasser:  $\Phi = 0,09 \text{ J/cm}^2$ ] verglichen. Die Fluenz wurde für jede Umgebung optimiert, so dass möglichst homogene LIPSS erzeugt werden konnten.

In der oberen Reihe in **Abb. 1** sind REM-Aufnahmen von Oberflächenbereichen in der Mitte der Bestrahlungssspots zu sehen, während die untere Reihe die entsprechenden zweidimensionalen Fourier-Transformationen (2D-FT) zeigt.

Bei der Laserbearbeitung von Silizium an Luft entstehen LSFL mit Perioden zwischen 520 und 620 nm senkrecht zur Polarisationsrichtung des Anregungslasers [**Abb. 1 (a) und 1 (c)**]. Diese Strukturen werden durch die Anregung von Oberflächenplasmonen (SPP) an der rauen Probenoberfläche erzeugt, wenn die halbleitende Siliziumoberfläche in einen metallischen Zustand aufgrund der angeregten Elektronen im Leitungsband übergeht. Die Interferenz des elektromagnetischen Feldes der SPP mit dem fs-Laserpuls moduliert räumlich die optische Energie, die auf das Material trifft und führt dazu, dass nach dem Schmelzen und der Ablation eine gewellte Oberfläche entsteht. Im Gegensatz dazu führt die Laserbearbeitung in Wasser zu deutlich kleineren LIPSS mit Perioden zwischen 80 und 130 nm (**Abb. 1 (b) und 1 (d)**) ebenfalls senkrecht zur Polarisationsrichtung.

Unter Verwendung des Dünnschicht (TF)-SPP Modells zusammen mit der Beschreibung der Ladungsträgerabhängigkeit der Dielektrizitätskonstante erklärt folgendes physikalische Szenario das beobachtete Verhalten: Es existiert eine dünne Schicht aus nicht-angeregtem Siliziumdioxid (Medium 1:  $\text{SiO}_2$ ) zwischen Laser-angeregtem Wasser (Medium 2) und dem Laser-angeregtem Silizium (Medium 3).

**Abb. 2** zeigt die für dieses Szenario mit drei verschiedenen Oxidschichtdicken  $t = 5, 10$  und  $20$  nm erhaltenen Perioden  $\Lambda_{\text{SPP}}$  zusammen mit der Kurve für das einzelne  $\text{H}_2\text{O}^*/\text{SiO}_2$ -Grenzflächen SPP-Modell. Zum Vergleich wurde der Bereich der  $\Lambda_{\text{LIPSS}} = (105 \pm 25) \text{ nm}$  aus **Abb. 1 (d)** als schraffierte Fläche dargestellt.

Die in **Abb. 2** gezeigten Ergebnisse demonstrieren eine deutliche Übereinstimmung zwischen den experimentellen LIPSS-Perioden und den SPP-Perioden, berechnet mit dem TF-SPP-Modell für Oxidschichtdicken zwischen 10 und 20 nm und einem Anregungsniveau des Wassers von rund  $3,6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . Mit anderen Worten, dieses Szenario sagt erfolgreich die experimentell beobachteten LIPSS-Perioden voraus, wenn die (transparente) Oxid-Schicht zwischen einer Laser-angeregten metallartigen Wasser- und Siliziumschicht eingeschlossen ist.

Unsere Ergebnisse zeigen eine einfache Möglichkeit der Erzeugung von verschiedenen periodischen Nanometerstrukturen zur Funktionalisierung von Oberflächen.

vides the corresponding two-dimensional Fourier transform (2D-FT) images.

For laser processing of silicon in air, LSFL with periods between 520nm and 620 nm are directed perpendicular to the polarization [**Figs. 1(a) and 1(c)**]. These structures are caused by the excitation of surface plasmon polaritons (SPP) at the rough air/sample surface when the semiconducting silicon surface turns into a metallic state due to the generation of electrons in the conduction band of the solid. The interference of the SPP electromagnetic field with the fs-laser pulse spatially modulates the optical energy deposited to the material and leads, after melting and ablation, to a corrugated surface relief. In contrast, for laser processing in water, significantly smaller LIPSS with periods between 80 and 130 nm are visible in **Figs. 1(b) and 1(d)** always perpendicular to the polarization direction.

Using the Thin Film (TF)-SPP model along with the description of the carrier-dependence of the dielectric permittivity the following physical scenario explains the observed behavior: a thin layer of non-excited silica (medium 1:  $\text{SiO}_2$ ) sandwiched between laser-excited water (medium 2) and laser-excited silicon (medium 3).

**Fig. 2** shows the period  $\Lambda_{\text{SPP}}$  obtained from that Scenario for three different oxide layer thicknesses  $t = 5, 10$ , and  $20$  nm along with the curve for the single  $\text{H}_2\text{O}^*/\text{SiO}_2$  interface SPP model. For comparison, the experimental range of  $\Lambda_{\text{LIPSS}} = (105 \pm 25) \text{ nm}$  estimated from **Fig. 1(d)** is shown as hatched area.

The results shown in **Fig. 2** clearly demonstrate a match between the experimental LIPSS periods and the SPP period calculated from the TF-SPP model for oxide layer thicknesses between 10 and 20 nm and water excitation levels around  $3.6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . In other words, this scenario successfully predicts the experimentally observed LIPSS periods when the (transparent) oxide layer is sandwiched between two metal-like laser-excited water and silicon layers.

Our results show a simple possibility of producing different periodic nanometer structures for functionalization of surfaces.

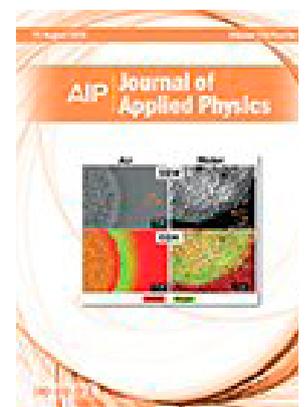
Original publication:

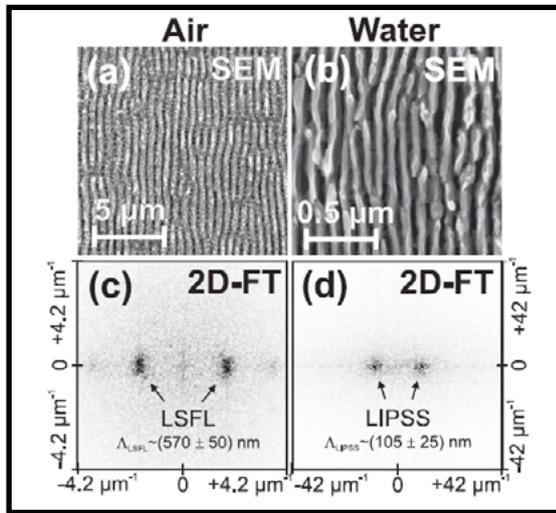
T.J.-Y. Derrien, R. Koter, J. Krüger, S. Höhm, A. Rosenfeld, J. Bonse:

„Plasmonic formation mechanism of periodic 100-nm-structures upon femtosecond laser irradiation of silicon in water“, *Journal of Applied Physics* 116, 074902 (2014)

<http://dx.doi.org/10.1063/1.4887808>

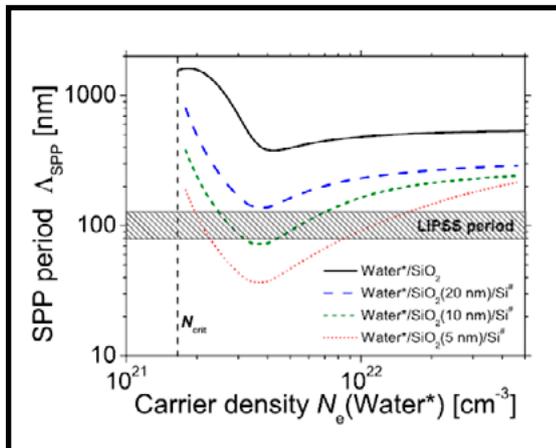
This was the featured article of the issue and Fig. 3 of that article is on the cover of the journal.





**Fig. 1:** SEM micrographs [(a) + (b)] and corresponding 2D-FT [(c) + (d)] of a silicon surface after irradiation with  $N = 100$  fs-laser pulses in air [(a) + (c):  $\Phi_o/\Phi_{th} \sim 1.3$ ] and in water environment [(b) + (d):  $\Phi_o/\Phi_{th} \sim 2.9$ ]. Note the different scale bars in (a) and (b). The laser beam polarization is horizontal.

**Abb. 1:** REM-Aufnahmen [(a) + (b)] und die entsprechenden 2D-FT-Darstellungen [(c) + (d)] einer Siliziumoberfläche nach der Bestrahlung mit  $N = 100$  fs-Laserpulsen im Luft [(a) + (c):  $\Phi_o/\Phi_{th} \sim 1.3$ ] und in Wasser [(b) + (d):  $\Phi_o/\Phi_{th} \sim 2.9$ ]. Zu beachten sind die unterschiedlichen Maßstäbe in (a) und (b). Der Laserstrahl ist horizontal polarisiert.



**Fig. 2:** Period of SPP modes as function of the laser-excited carrier density  $N_e$  of the water environment, calculated using a TF-SPP model (blue, green, and red lines) for three different thicknesses  $t$  of the silicon oxide layer. The carrier density of the laser excited silicon has been fixed to  $6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ . For comparison, results calculated on basis of a single interface model are given as black line. Note the double-logarithmic scaling. The hatched region indicates the experimentally observed LIPSS periods.

**Abb. 2:** Perioden von SPP-Moden als Funktion der laserangeregten Ladungsträgerdichte  $N_e$  des Wassers, berechnet unter Verwendung eines TF-SPP-Modells (blaue, grüne, und rote Linien) für drei verschiedene Dicken  $t$  der Siliziumoxid-Schicht. Die Ladungsträgerdichte des Lasers-angeregten Siliziums ist mit  $6 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  festgesetzt. Zum Vergleich der Ergebnisse ist die auf der Basis einer einzigen Übergangsschicht durchgeführte Berechnung als schwarze Linie dargestellt. Zu beachten ist die Doppellogarithmische Darstellung. Der schraffierte Bereich zeigt die experimentell beobachteten LIPSS Perioden an.

Kontakt: Arkadi Rosenfeld, Tel. 1214



## Forschungsergebnisse

### Je länger desto besser: Langwellige Lichtimpulse erzeugen brillante ultrakurze harte Röntgenblitze

Das Projektteam 3.3 und die Technische Universität Wien präsentieren eine neue, kompakte Laborquelle für ultrakurze, harte Röntgenimpulse mit einem bisher unerreichten Photonenfluss.

Röntgenstrahlen sind ein Schlüsselwerkzeug zum Abbilden der Struktur von Materialien und der Analyse ihrer Zusammensetzung - beim Arzt, im Chemielabor und in den Materialwissenschaften. Strahlt man sogenannte harte Röntgenstrahlung, die eine zum Abstand zwischen Atomen vergleichbare Wellenlänge besitzt, auf ein Material, so kann man die räumliche Anordnung der Atome aus dem Muster der gestreuten Röntgenstrahlung bestimmen. Diese Standardmethode hat bislang Gleichgewichtsstrukturen von wachsender Komplexität entschlüsselt, angefangen von einfachen anorganischen Kristallen bis zu hochkomplexen Biomolekülen wie die Erbsubstanz DNS oder großen Eiweißmolekülen.

Heutzutage sind viele Wissenschaftler bestrebt, den Atomen beim „Arbeiten“ zu zuschauen, d.h. sie wollen direkt die Bewegung der Atome bei einer Schwingung, chemischen Reaktion oder auch Materialmodifikation beobachten. Atomare Bewegungen erfolgen typischerweise in einem Zeitbereich von Femtosekunden (1 Femtosekunde =  $10^{-15}$  Sekunden). Daher benötigt man für solch einen „Röntgenfilm“ eine extrem kurze Belichtungszeit mit entsprechend kurzen Röntgenblitzen. Es gibt weltweit zwei komplementäre Herangehensweisen um ultrakurze harte Röntgenimpulse zu erzeugen. Auf der einen Seite gibt es die Großmaschinen, z.B. Elektronenbeschleuniger wie die Freien Elektronen Laser (FEL) in Stanford USA (LCLS bei SLAC) oder bei SACLA in Japan. Auf der anderen Seite kann man kompakte Laborquellen für ultrakurze harte Röntgenimpulse bauen, die von Femtosekunden-Lasersystemen getrieben werden. Obwohl der Röntgenfluss aus den Beschleunigerquellen deutlich höher ist als in den Laborquellen, haben sich die letzteren als geeignete Kameras für die Femtosekunden-„Röntgenfilme“ herausgestellt. Die Qualität solcher Filme ist letztendlich durch die Anzahl der von der untersuchten Probe gestreuten Röntgenphotonen bestimmt. Das Projektteam des MBI und der Technischen Universität Wien haben jetzt einen Durchbruch für kompakte Laborquellen geschaffen und den Fluss harter Röntgenstrahlung um einen Faktor 25 gesteigert. In der neuesten Ausgabe der Fachzeitschrift Nature Photonics beschreiben sie eine Kombination aus einem neuen optischen Treiberlaser, der Femtosekunden-Lichtimpulse bei Wellenlängen um 4000 nm (4  $\mu$ m) im mittleren Infrarot liefert,

## Research Highlights

### The longer the better: Optical long-wavelength pulses generate brilliant ultrashort hard x-ray flashes

The project team 3.3 and the Technical University of Vienna present a novel table-top source of ultrashort hard x-ray pulses with an unprecedented photon flux.

X-rays are a key tool for imaging materials and analyzing their composition - at the doctor, in the chemistry lab and in materials research. Shining so-called hard x-rays of a wavelength comparable to the distance between atoms on the material, one can determine the atomic arrangement in space by analyzing the pattern of scattered x-rays. This method has unraveled equilibrium time-averaged structures of increasing complexity, from simple inorganic crystals to highly complex biomolecules such as DNA or proteins.

Today, there is a strong quest for mapping atoms ‘on the fly’, that is, for following atomic motions in space, during a vibration, a chemical reaction, or a change of the material's structure. Atomic motions typically occur in the time range of femtoseconds (1 femtosecond =  $10^{-15}$  seconds), requiring an exposure by extremely short x-ray flashes to take snapshots. There are essentially two complementary approaches to generate ultrashort hard x-ray pulses, large scale facilities based on electron accelerators such as the free electron lasers in Stanford (LCLS at SLAC) or at SACLA in Japan, or highly compact table-top sources driven by intense ultrashort optical pulses. While the overall x-ray flux from accelerator sources is much higher than from table-top sources, the latter are versatile tools for making femtosecond x-ray ‘movies’ with a quality that is eventually set by the number of x-ray photons scattered from the sample. The project team of MBI and the Technical University in Vienna has now accomplished a breakthrough in table-top x-ray generation, allowing for an enhancement of the generated hard x-ray flux by a factor of 25. As they report in the current issue of Nature Photonics, the combination of a novel optical driver providing femtosecond mid-infrared pulses around a 4000 nm (4  $\mu$ m) wavelength with a metallic tape target allows for generating hard x-ray pulses at a wavelength of 0.154 nm with unprecedented efficiency.

The x-ray generation process consists of 3 steps (Fig. 1), (i) electron extraction from the metal target induced by the electric field of the driving pulse, (ii) electron acceleration in vacuum by the strong optical field and return into the target with an increased kinetic energy, and (iii) generation of x-rays in the target by inelastic collisions of electrons with atoms. Longer optical wavelengths are equivalent to a longer oscillation pe-



und einem Metallband-Target in einer Vakuumkammer, welche ultrakurze Impulse harter Röntgenstrahlung bei einer Wellenlänge von 0,154 Nanometern mit einer nicht da gewesenen Effizienz erzeugt.

Die Röntgenerzeugung erfolgt in 3 Schritten (Abb. 1), (i) Elektronenextraktion aus dem Metallband mittels des elektrischen Feldes des Treiber-Lichtimpulses, (ii) Beschleunigung der Elektronen im Vakuum durch das starke optische Feld und Rückkehr in das Band mit einem ungeheuren Gewinn und kinetischer Energie, und (iii) die Erzeugung von Röntgenblitzen durch inelastische Stöße der energetischen Elektronen mit den Metallatomen im Band. Längere optische Wellenlängen entsprechen einer längeren Oszillationsperiode des optischen Feldes und führen daher zu einer längeren Beschleunigungszeit der Elektronen im Vakuum. Eine Konsequenz der längeren Beschleunigungszeit ist die deutlich höhere kinetische Energie, mit der die Elektronen in das Metallband einschlagen, was zu einer deutlich höheren Effizienz bei der Röntgenerzeugung führt. Die Situation ähnelt stark der von Turmspringern, die von verschiedenen hohen Plattformen eines Sprungturms ins Wasser springen (Abb. 2). Auch dort bestimmt die Zeitspanne  $\Delta t$  des freien Falls die kinetische Energie des Springers beim Eintauchen in das Wasser. Die Energie ist proportional zu  $\Delta t^2$ . Die feldgetriebenen Exkursionen der Elektronen im Vakuum wurden im Detail in theoretischen Rechnungen analysiert und werden in der beigefügten Animation gezeigt (Abb. 3).

Die Experimente wurden an der TU Wien durchgeführt, wo die Forscher ein neues Treiber-Lasersystem, das auf dem Konzept der „Optical Parametric Chirped Pulse Amplification“ (OPCPA) beruht, mit einer Röntgen-Erzeugungskammer des MBI kombinierten. Lichtimpulse von 80 fs Dauer und einer Energie bis zu 18 mJ bei einer Zentralwellenlänge von 3900 nm (3,9  $\mu\text{m}$ ) wurden auf ein 20  $\mu\text{m}$  dickes Kupferband fokussiert. Dieses Konzept erlaubt die nie da gewesene Erzeugung von einer Milliarde harter Röntgenphotonen pro Laserschuss bei einer Wellenlänge von 0,154 nm. Gegenüber früheren Experimenten mit einer Treiberwellenlänge von 800 nm zeigt sich eine Überhöhung um den Faktor 25, was etwa dem Quadrat des Wellenlängenverhältnisses  $(3900 \text{ nm}/800 \text{ nm})^2$  entspricht. Dieses Verhalten ist in quantitativer Übereinstimmung mit der theoretischen Analyse basierend auf dem 3-Stufen Konzept in (Abb. 1.) Die bahnbrechenden Ergebnisse weisen den Weg für neue, kompakte Laborquellen, mit denen man bis zu  $10^{10}$  x-ray Röntgenphotonen pro Laserschuss bei einer Wiederholrate von 1000 Hz erzeugen wird.

riod of the optical field and, thus, to a longer period of electron acceleration in vacuum. As a result, the accelerated electrons acquire a higher kinetic energy before they re-enter the target and generate x-rays with a higher efficiency. A simple analogy of the acceleration process is the mechanical acceleration when jumping from platforms at different height into water (Fig. 2). Here, the time interval  $\Delta t$  between leaving the platform and reaching the water surface increases with height and the kinetic energy at the water surface is proportional to  $\Delta t^2$ . The electron pathways in vacuum were analyzed in detail by theoretical calculations and are shown in the movie attached (Fig. 3).

The experiments were performed at the TU Vienna combining a novel driver system based on Optical Parametric Chirped Pulse Amplification (OPCPA) with an x-ray target chamber from MBI. Pulses of 80 fs duration and up to 18 mJ energy at a center wavelength of 3900 nm (3.9  $\mu\text{m}$ ) were focused down onto a 20  $\mu\text{m}$  thick copper tape. This scheme allows for generating an unprecedented number of 109 hard x-ray photons at a 0.154 nm wavelength per driving pulse. A comparison with previous experiments performed with 800 nm driver pulses shows that the enhancement of the x-ray flux in the new scheme scales with the square of the wavelength ratio, i.e.,  $(3900 \text{ nm}/800 \text{ nm})^2 \approx 25$ . This behavior is in quantitative agreement with a theoretical analysis of the 3-step generation scheme of Fig. 1. The results pave the way for a new generation of table-top hard x-ray sources, providing up to  $10^{10}$  x-ray photons per pulse at elevated, e.g., kilohertz repetition rates.

#### Originalveröffentlichung:

Jannick Weisshaupt, Vincent Juvé, Marcel Holtz, ShinAn Ku, Michael Woerner, Thomas Elsaesser, Skirmantas Ališauskas, Audrius Pugzlys and Andrius Baltuška

*High-brightness table-top hard X-ray source driven by sub-100 femtosecond mid-infrared pulses*

Nature Photonics doi:10.1038/nphoton.2014.256

<http://www.nature.com/nphoton/journal/vaop/ncurrent/full/nphoton.2014.256.html>

Contact: Jannick Weisshaupt, Tel. 1471

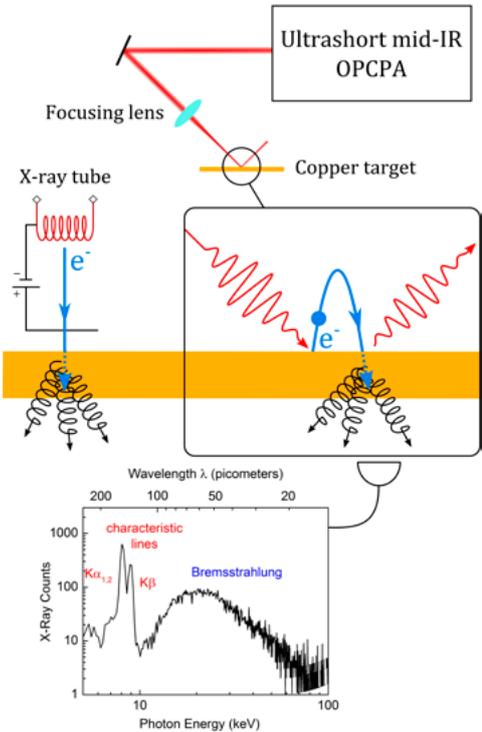


Abb. 1: Links: Erzeugung von Röntgenstrahlen in einer konventionellen Röntgenröhre. Elektronen werden von der geheizten Kathode (-) emittiert und dann durch ein konstantes elektrisches Feld auf die Anode (+) zu beschleunigt. Innerhalb der Metall-Anode (z.B. Kupfer) führen inelastische Stöße der Elektronen mit den Metallatomen zur Erzeugung von sowohl charakteristischer Linienemission von Röntgenstrahlung (schmale Linien im unteren Spektrum) als auch von Bremsstrahlung. Rechts: Femtosekunden Lichtimpulse im mittleren Infrarot ( $\lambda = 3900 \text{ nm}$ ) aus einem OPCPA-System werden auf ein Kupfer-Bandtarget fokussiert. Die Elektronen werden durch das starke elektrische Feld des Lichtimpulses zunächst aus der Oberfläche herausgezogen, danach im Vakuum beschleunigt und schließlich in das Kupferband zurückgeschossen. Während der Abbremsung im Metallband produzieren die energetischen Elektronen charakteristische Linienemission und Bremsstrahlung, welche von einem Röntgendetektor gemessen wird.

Fig. 1: Left: x-ray generation in a conventional x-ray tube. Electrons which were emitted from the heated cathode (-) are accelerated by a constant electric field towards the anode (+). Within the metal target (e.g. copper) inelastic collisions of the accelerated electrons with atoms lead to the generation of both characteristic line emission of x-rays (sharp lines in the spectrum at the bottom) and Bremsstrahlung. Right: Femtosecond mid-infrared pulses ( $\lambda = 3900 \text{ nm}$ ) from a OPCPA system are focused onto a copper band target. Electrons are extracted from the surface, accelerated into the vacuum and smashed back into the target by the strong electric field of the light. During deceleration in the metal target the energetic electrons produce characteristic line emission and Bremsstrahlung which can be measured by an x-ray detector.



Abb. 2: Analogie der Elektronenbeschleunigung im Vakuum mit der Beschleunigung eines Turmspringers in der Schwerkraft der Erde, wenn er von verschiedenen Plattformen des Turmes springt. Längere Wellenlängen entsprechen längeren Oszillationsperioden des optischen Feldes und führen zu einer zeitlich längeren Beschleunigung der Elektronen im Vakuum. Der Zeitabschnitt  $\Delta t$  zwischen Verlassen der Plattform und Eintauchen in die Wasseroberfläche steigt mit der Absprunghöhe und die kinetische Energie des Springers an der Wasseroberfläche ist proportional zu  $\Delta t^2$ . Analog erhalten Elektronen in einer längeren Beschleunigungsphase  $\Delta t$  auch eine deutlich höhere kinetische Energie bevor sie in das Metallband einschlagen. Das führt wiederum zu einer effizienteren Erzeugung von Röntgenstrahlen.

Fig. 2: Analogy of electron acceleration in the vacuum to the acceleration by gravity when jumping from platforms at different height into water. Longer optical wavelengths are equivalent to a longer oscillation period of the optical field and, thus, to a longer period of electron acceleration in vacuum. The time interval  $\Delta t$  between leaving the platform and reaching the water surface increases with height and the kinetic energy at the water surface is proportional to  $\Delta t^2$ . As a result, electrons accelerated in longer time interval  $\Delta t$  acquire a higher kinetic energy before they re-enter the target and generate x-rays with a higher efficiency.

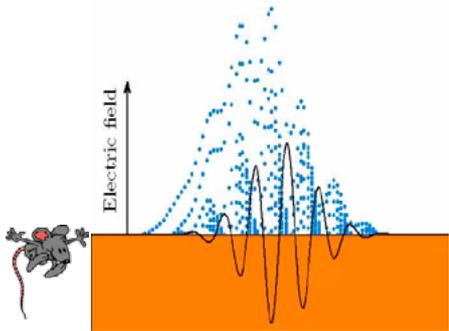


Abb. 3: Animation der Beschleunigung von Elektronen (blaue Kugeln) im Vakuum oberhalb der Metalloberfläche, die dem starken, oszillierenden, elektrischen Feld des Laserimpulses ausgesetzt sind (schwarze Kurve).

Abb. 3: Movie of the acceleration of electrons (blue balls) in the vacuum above a metal surface when applying the strong oscillating electric field of the laser pulse (black line).



## Forschungsprojekte

### Die neue Emmy Noether Nachwuchsgruppe am MBI stellt sich vor:

Seit Oktober 2014 befindet sich in Bereich C die neue Emmy Noether Nachwuchsgruppe im Aufbau. Dem Nachwuchsgruppenleiter Dr. Benjamin Fingerhut gelang es bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) eine Start-Förderung innerhalb des Emmy Noether-Programms ein zu werben. Das Emmy Noether-Programm möchte Nachwuchswissenschaftlern einen Weg zur frühen wissenschaftlichen Selbständigkeit eröffnen. Die Förderdauer beträgt fünf Jahre und umfasst die zur Durchführung des Projekts erforderlichen Personal-, Sach- und sonstigen Mittel.

Die wissenschaftliche Zielsetzung des Emmy Noether Projektes umfasst die Entwicklung neuer Simulationsalgorithmen für moderne zeitaufgelöste Methoden der Schwingungs- und Optischen Spektroskopie. Beide Techniken nutzen unterschiedliche Beobachtungsfenster um eine Echtzeit-Beobachtung von ultraschneller Reaktionsdynamik zu ermöglichen. Die entwickelten Simulationsprotokolle sollen letztendlich dazu beitragen komplexe biomolekulare Dynamik zu untersuchen und ein mikroskopisches Bild von fundamentalen Reaktionsmechanismen zu entwickeln.

Ein Forschungsschwerpunkt liegt hierbei auf dem mikroskopischen Verständnis von elektronischer Anregungsdynamik. Die Nachwuchsgruppe wird photo-physikalische Relaxationsphänomene von ultraschnellen Photoreaktionen untersuchen um enzymatische Reaktionsmechanismen zu quantifizieren. Ein Beispiel stellt der Reparaturmechanismus des 6-4 DNA Photoschadens durch Photolyase dar (A). Lichtabsorption durch DNA induziert gesundheitsschädliche Photoschäden welche zu Zelltod und Krebs führen können. Die Natur verwendet spezialisierte Reparaturenzyme, genannt Photolyasen, welche in der Lage sind Photoschäden zu reversieren und die Integrität des Genoms wieder her zu stellen (als Literaturhinweis siehe Ref. [1-3]). Unser Ziel ist es verschiedene mechanistische Vorschläge durch die Vorhersage experimenteller Observablen, insbesondere charakteristischer Markerbanden in zeitaufgelösten IR und 2D UV/Vis Signalen, zu quantifizieren. Die Echtzeitdetektion der komplexen molekularen Umlagerungen in 6-4

## Research Projects

### The New Emmy Noether junior research group at the MBI:

Starting October 2014 a new Emmy Noether junior research group is established within Division C. The junior research group leader Dr. Benjamin Fingerhut was awarded an Emmy Noether Programme startup grant of the German Research Foundation (DFG) intended to support young researchers in achieving independence at an early stage of their scientific careers. The grant period is five years and funding includes the funds for personnel, material and other resources for implementing the project.

The scientific aim of the Emmy Noether project is the development of novel simulation algorithms for state-of-the-art time resolved vibrational and optical spectroscopic techniques. Both techniques exploit different windows of observation to provide a real time view of ultrafast reaction dynamics. The developed simulation protocols will help to investigate complex biomolecular dynamics and develop a microscopic view of fundamental reaction mechanisms.

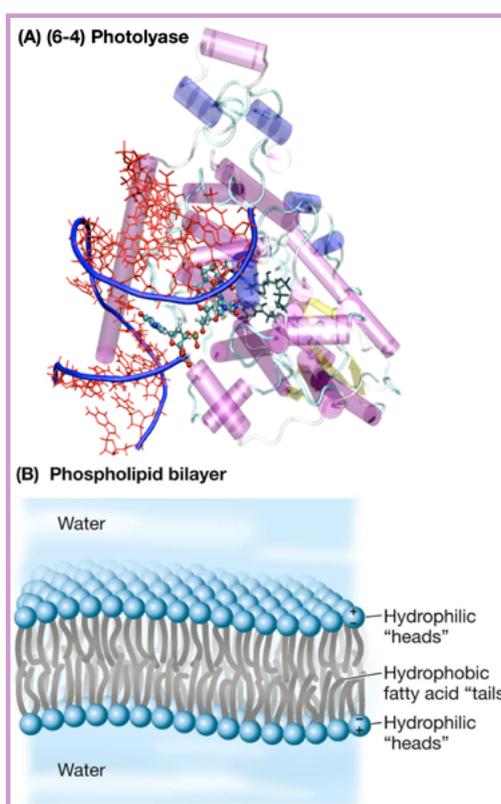


Fig. 1: (A) X-ray structure of (6-4) Photolyase [4]; (B) Figure adopted from [5].

A first focus of research will be on a microscopic understanding of electronic excitation dynamics. The junior research group will investigate photo-physical relaxation phenomena of ultrafast photoreactions in order to quantify enzymatic reaction mechanisms. One example is the photolyase mediated repair mechanism of 6-4 DNA photolesions (A). Light absorption by DNA induces harmful photolesions which can lead to cell death and cancer. Nature utilizes specialized repair enzymes, called photolyases which are able to revert the photolesions and reestablish the integrity of the DNA genome (for further reading see Ref. [1-3]). Our aim is to quantify mechanistic proposals by predicting experimental observables, like characteristic marker bands in time resolved IR and 2D UV/Vis signals. The real time detection of the complex molecular rearrangements in (6-4) photolyase will allow to characterize transient radical pair reaction intermediates in order to resolve the controversy regarding the mechanism. Hereby a mechanistic understanding of



Photolyase erlaubt es transiente Radikalpaar-Intermediate zu charakterisieren, um einen Beitrag zur Beendigung der Kontroverse bezüglich der widersprüchlichen mechanistischen Vorhersagen zu liefern. Des Weiteren soll ein mechanistisches Verständnis der katalytischen Beiträge des Enzyms entwickelt werden welches die limitierenden Faktoren der Reparaturquantenausbeute verschiedener DNA Photoschäden erklärt.

Einen weiteren Schwerpunkt stellen Phänomene in kondensierter Phase im elektronischen Grundzustand dar. Wir untersuchen Strukturfluktuationen induziert durch Solvation auf der ultraschnellen Zeitskala. Biochemische Prozesse beinhalten typischerweise die Wechselwirkung von Wasser mit funktionellen Gruppen von Biomolekülen. Geladene Phosphate stellen hierbei einen integralen Bestandteil von Makromolekülen, wie DNA und Phospholipiden, dar, in welchen die Hydratation der Phosphat-Solvations-Hotspots die Stabilität und Struktur der DNA-Doppelhelix und Zellmembran bestimmt (B). Während die Gleichgewichtsstrukturen hinlänglich verstanden sind, besteht erhebliches Interesse in der Untersuchung der ultraschnellen Dynamik. Fluktuationen der Hydratations-Hülle und Schwingungs-Energierelaxation erfolgen auf der Femto- bis Pikosekunden Zeitskala und stellen die relevanten Prozesse für elementare biochemische Reaktionen in lebenden Organismen dar. Ein detailliertes Verständnis dieser Phänomene erfordert die Kenntnis über den Charakter und die Dynamik von Phosphat-Wasser Wasserstoffbrückenbindungen welche durch kurz-reichweitige Fluktuationen und lang-reichweitige Coulomb-Wechselwirkungen der geladenen Gruppen bestimmt werden. Die beteiligten Kernbewegungen können direkt durch Zeit- und Frequenz-aufgelöste Infrarot Techniken verfolgt werden. Die Forschung der neuen Emmy Noether Nachwuchsgruppe wird die Vorhersage und Simulation experimenteller Signaturen auf der ultraschnellen Zeitskala umfassen, um einen direkten Vergleich zu modernsten, am MBI durchgeführten, zeitaufgelösten Messungen zu ermöglichen.

Die theoretischen Entwicklungen des Projektes sollen somit spektroskopische Signaturen der frühesten mechanistischen Schritte von wichtigen biologischen Prozessen aufdecken. Durch die Verknüpfung von Protein- und Hydrations-Strukturen mit Licht-induzierter Dynamik, soll so ein umfassendes Bild von biomolekularen Reaktionsmechanismen erhalten werden.

the catalytic contributions of the enzyme will be developed to explain the limiting factors of the repair quantum yield of different kinds of DNA photolesions.

A second focus will be on ground state condensed phase phenomena. We will investigate structure fluctuations induced by solvation on the ultrafast timescale. Biochemical processes typically involve the interaction of water with functional groups of biomolecules. Charged phosphate groups are integral parts of macro-molecules such as DNA and phospholipids where hydration of the phosphate solvation hotspots determine stability and structure of the DNA double helix and cell membranes (B). While their equilibrium structures are well understood, there is a substantial interest in the investigation of the ultrafast dynamics. Fluctuations of the hydration structure and vibrational energy relaxation occur on a femto- to picosecond timescale and are the relevant processes for elementary biochemical reactions in living organisms. A detailed understanding of these phenomena requires knowledge about the character and dynamics of phosphate-water hydrogen bonds (HB) that are determined by short-range fluctuations and long-range Coulomb interactions of the charged groups. The involved molecular motions can be directly observed by time- and frequency resolved infrared techniques. The research of the new Emmy Noether junior research group will focus on prediction and simulation of experimental signatures on the ultrafast timescale for a direct comparison to state-of-the-art time resolved measurements performed at the MBI.

The theoretical developments of the project intend to uncover spectroscopic signatures of the earliest mechanistic steps of biological important processes by relating the protein and hydration structures to the light induced dynamics and observables to provide a comprehensive picture of the biomolecular reaction dynamics.



Benjamin P. Fingerhut, Sandra Mierschink, Martin Richter

Kontakt: B. Fingerhut, 1404

#### Referenzen:

- [1] Mechanism of UV-Induced Formation of Dewar Lesions in DNA. K. Haiser, B. P. Fingerhut, K. Heil, A. Glas, T. T. Herzog, B. M. Pilles, W. J. Schreier, W. Zinth, R. de Vivie-Riedle, and T. Carell, *Angew. Chem. Int. Ed.* 51, 408-411 (2012).
- [2] Mechanism of UV-induced Dewar lesion repair catalysed by DNA (6-4) photolyase. B. P. Fingerhut, K. Heil, E. Kaya, S. Oesterling, R. de Vivie-Riedle, and T. Carell, *Chem. Sci.* 3, 1794-1797 (2012).
- [3] Femtosecond Stimulated Raman Spectroscopy of the Cyclobutane Thymine Dimer Repair Mechanism: A Computational Study. H. Ando, B. P. Fingerhut, K. E. Dorfman, J. D. Biggs, and Shaul Mukamel, *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 14801-14810 (2014).
- [4] Crystal Structure and Mechanism of a DNA (6-4) Photolyase. M. J. Maul, T. R. M. Barends, A. F. Glas, M. J. Cryle, T. Domratcheva, S. Schneider, I. Schlichting, and T. Carell, *Angew. Chem. Int. Ed.* 47, 10076-10080 (2008).
- [5] *Life: The Science of Biology*, 8th. Ed., Sinauer Associates, Inc. and W. H. Freeman & Co., Fig. 3.20 (2007)



## The Annual MBI Symposium 2014

Am 4. und 5. September fand das erste „Jährliche Symposium“ des Max Born Instituts statt, das in Ergänzung zum MBI Tag seinen festen Platz im Institutskalender einnehmen soll.



**Unsere Wissenschaftler / Our scientists at MBI**

## The annual MBI symposium 2014

This year the beginning of September was marked by a two-day special event - the first annual symposium of Max Born Institute, - which we hope will grow into an annual tradition.

Seit langem ist es Tradition, am MBI Tag über die Aufteilung und Vergabe der Finanzmittel auf die Forschungsprojekte zu diskutieren. Bedingt durch den engen Zeitrahmen für die Projektpräsentationen besteht hier jedoch wenig Gelegenheit für eine wissenschaftliche Diskussion. Der daraus entstandene Wunsch nach einer Veranstaltung, die dem vertieften wissenschaftlichen Austausch unter den beteiligten Studenten, Doktoranden und Wissenschaftlern beiderlei Geschlechts gewidmet sein sollte, wurde auf Betreiben der Direktoren und Projektkoordinatoren ein jährliches zweitägiges Symposium ins Leben gerufen, dessen Agenda von uns, dem Organisationskomitee, erarbeitet wurde.

Als Termin für das Symposium bot sich der Zeitraum vor der jährlich stattfindenden Sitzung des wissenschaftlichen Beirats (SAB) Ende September an. Dadurch sollte das Symposium auch als intensive und gemeinsame Vorbereitung auf die SAB-Sitzung genutzt werden. Diese Zusammenlegung bringt den großen Vorteil, dass die Projektmitarbeiter mit der Vorbereitung eines Symposiums nur geringfügig zusätzlich belastet werden. Die Agenda des ersten Symposiums gestaltete sich wie folgt: Im Rahmen eines 15 minütigen Übersichtsvortrags stellten die Projektkoordinatoren die allgemeine wissenschaftliche Zielsetzung und Bedeutung der zehn Projekte vor. Auf jeden Übersichtsvortrag folgte eine „Highlight“-Präsentation vornehmlich junger Wissenschaftler, d.h. Postdocs oder Doktoranden, die in 30 Minuten über ein herausragendes wissenschaftliches Forschungsergebnis ihres Projektes berichteten. Der Zeitrahmen erlaubte es den Vortragenden, die zum Verständnis des Highlights notwendigen wissenschaftlichen Grundlagen so ausführlich zu präsentieren, dass auch projektfremde interessierte Institutsmitglieder davon profitieren konnten.

Da die Vorträge nicht die ganze Breite der Forschung eines Projekts abbilden können, wurden im Anschluss an die Vorträge Posterpräsentationen anberaumt. Auf jeweils bis zu drei Postern wurden die in einem Projekt im abgelaufenen Jahr

For many years it has been a tradition to present scientific advances of various projects at the MBI day, which takes place in the beginning of the year. And for many years it has been clear that one day cannot accommodate the wide and vibrant agenda of our research, especially when financial questions should be given a preference. The endeavor to improve internal scientific communication has thus led the project coordinators and the directors to the idea of a new internal conference, dedicated to sharing the scientific knowledge between the members of the MBI, which has taken the shape of the two-day symposium. As far as we can judge now, this was a good decision. The choice of the dates for the symposium emphasizes the second goal of the event: preparation for the annual meeting of the scientific advisory board (SAB), which typically takes place in the end of September.

The combination of these two goals has quickly led us, the organizing committee, to the suitable agenda: the meeting should include overview talks of the project coordinators, which describe the general directions and purposes of the 10 projects composing the MBI scientific program; there should be plenty of discussion time at the posters serving both for communication between the colleagues and as preparation for the SAB meeting.

Finally, highlight talks should be given, which present the most interesting scientific advances of each project to the MBI audience. While this agenda certainly cannot fit all activities of the MBI scientists (a week-long conference would not be enough), it is sufficiently flexible for everyone to have a chance to learn from colleagues or report to colleagues. We have specifically emphasized to the project coordinators that the highlight talk should be given by our young scientists to give them the opportunity to learn the art of scientific presentation and increase their visibility in the project structures.

As far as we can tell know, the event turned out to be a success. We have received only positive feedback with valuable



erarbeiteten wissenschaftlichen Resultate sowie geplante Forschungsaktivitäten vorgestellt. Die sich daraus entwickelnde wissenschaftliche Diskussion diente dem Erfahrungsaustausch innerhalb des Instituts und als Generalprobe für die Beiratssitzung, bei der die Poster interessierten Beiratsmitgliedern erläutert werden. Insgesamt stieß das Symposium auf positive Resonanz und wird einen festen Platz im Veranstaltungskalender des MBI finden.

Die Veranstaltung endete mit der Verleihung zweier spontan eingerichteter Preise, die, so hoffen wir, ein fester Bestandteil der Veranstaltung bleiben werden. Die beiden Preisträger wurden nach kurzer, aber intensiver Beratung des Auswahlkomitees, bestehend aus dem Direktorium und des Organisationskomitees, ermittelt. Der Preis für den besten Highlight Vortrag wurde Jannick Weisshaupt zugesprochen, der mit seinem Vortrag neue Entwicklungen im Bereich der Erzeugung harter Röntgenstrahlen mit Laborlichtquellen überzeugend präsentierte und eine intensive wissenschaftliche Diskussion stimulierte. Der zweite Preis, ausgelobt für die aktivste Rolle in der wissenschaftlichen Diskussion, wurde einstimmig Prof. Misha Ivanov verliehen, der viele konstruktive Fragen zum physikalischen Kern der jeweiligen Thematik stellte und die Diskussion stark belebte. Obwohl wir uns in Zukunft auch hier einen Preisträger aus dem Feld der jüngeren Wissenschaftler wünschen würden, sehen wir einen harten Wettbewerb mit Misha voraus. Abschließend möchten wir allen Kollegen danken, die dem Symposium beigewohnt und durch Vorträge, Poster und Diskussionen zum Erfolg beigetragen haben. Namentlich möchten wir uns bei Herrn Grimm, Frau Brigel, Frau Wettstein, Herrn Katz, Frau Simon, Frau Wende und Herrn Hentschel für die Unterstützung und Organisation vor und während des Symposiums bedanken.

Das Organisationskomitee

U. Eichmann, U. Griebner, O. Kornilov



Jannick Weisshaupt wurde für den besten Highlight Vortrag ausgezeichnet.

Jannick Weisshaupt was awarded for the best highlight talk.

suggestions to the timing and talk instructions, but accepting this scheme in general.

The symposium was concluded by the award ceremony, which, we hope, also will be a part of the tradition. Two prizes were handed in upon a short meeting of the election committee (the organizers and the directors).

One, for the best highlight talk, went to *Jannick Weisshaupt*, who delivered a very impressive presentation on the new developments in the table-top hard x-ray sources. This nomination was intentionally restricted to the PhD students. The second prize, for the most active participation in the discussion, went to *Prof. Misha Ivanov*. We hope that in the future the young scientists will also be contenders for this award, though we do realize that it is very hard to compete with Misha.

In conclusion, we would like to express our gratitude to the colleagues, who supported and helped to organize the symposium (especially Mr. Grimm, Mrs. Brigel, Mrs. Wettstein, Mr. Katz, Mrs. Simon, Mrs. Wende and Mr. Hentschel) and thank all our colleagues for attending the event. Let's hope that this will become another good tradition at MBI.

The organizing committee

U. Eichmann, U. Griebner, O. Kornilov



Prof. Misha Ivanov wurde ausgezeichnet für die aktivste Rolle in der wissenschaftlichen Diskussion.

Prof. Misha Ivanov was awarded for the most active participation in the discussion.



## Tage der Forschung

Am 25. und 26. September fanden in Adlershof die „Tage der Forschung“ statt, eine Veranstaltung an der sich das MBI traditionell beteiligt. Die Tage der Forschung werden gemeinsam von der IGafa, der Humboldt-Universität zu Berlin und der WISTA-MANAGEMENT GMBH veranstaltet. Sie bieten Schülerinnen und Schülern der gymnasialen Oberstufe die Gelegenheit, sich vor Ort einen Eindruck von ihren Studien- und Arbeitsmöglichkeiten zu machen, und mit Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern ins Gespräch zu kommen.

Das MBI konnte in diesem Jahr zwei Programmpunkte beisteuern:

Maria Richter, Doktorandin in der Theorie-Gruppe von Olga Smirnova, führte die jeweils acht Teilnehmerinnen und Teilnehmer ihrer mehrfach angebotenen Übung in die Theoretische Physik ein. Sie zeigte, wie man quantenmechanische Vorgänge in der Natur am Computer simulieren kann und die Schülerinnen und Schüler konnten anschließend in Gruppen oder individuell das Erlernte am Computer ausprobieren.

Verschiedenste optische Experimente mit Licht und Spiegeln wurden von Sandra Höhm und Stephan Marschner angeboten. Die jeweils 10 Schülerinnen und Schüler konnten in den Übungen versuchen, einen Laserstrahl zu justieren und sie erfuhren, welche Farbe das Licht hat. Außerdem konnten sie Experimente mit dem Handspektrometer durchführen.

Frau Höhm und Frau Richter haben sich bereits wiederholt bei Veranstaltungen wie dem Girl's Day oder den Tagen der Forschung.

Kontakt: A. Grimm, Tel. 1500

## Days of Research

On September 25-26, MBI participated in the „Days of Research“ (Tage der Forschung). The Days of Research are jointly organized by IGafa, Humboldt-University and WISTA-MANAGEMENT GMBH. The event offers high school students the unique opportunity to gain an impression of future studies and working options in science. In addition, they have the opportunity to talk to scientists face-to-face.

The MBI offered the following two courses:

Maria Richter, PhD student of Olga Smirnova's theory group introduced the participants (eight per group) to questions of theoretical physics. She demonstrated how quantum mechanical phenomena can be computer simulated. Afterwards the students could try out themselves on the computer what they've learned, individually or in a group.

Sandra Höhm and Stephan Marschner offered several optical experiments. The students could try to align a laser beam and they learned what color light has. In addition, they could do experiments with handheld spectrometers.

Sandra Höhm and Maria Richter also have co-organized events like the Girl's Day or the Days of Research several times in the past. MBI would like to thank them and everyone else who was helping.

Contact: Grimm, Tel. 1500

## Termine - Save the date

Mittwoch, 14. Januar 2014  
Wednesday 14<sup>th</sup> January 2014

**MBI Tag / MBI Day**

Mittwoch, 17.12.2014 ab 14 Uhr im Max-Born-Saal

**Unsere gemeinsame Weihnachtsfeier**

Wednesday, December 17, 2014 at Max-Born-Saal

Start at 2 p.m

**Our joint Christmas party**

Montag, 1. Dezember 2014/10:00 Uhr

Monday 1<sup>st</sup> December 2014/10:00 a.m.

**Gemeinsame Betriebs- und Institutsversammlung**

**MBI Works Assembly and The Institute's Meeting**

## Auszeichnung

Wir gratulieren.

