

# MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 18 - Mai 2015

## Inhalte

Editorial  
Personalinformationen / Preise  
Betriebsrat  
Forschungsergebnisse/Research  
Highlights  
Projekteinwerbung  
EDV/IT  
Allgemeines

## Editorial

Liebe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter,

Sicherheit und Gesundheit am Arbeitsplatz sind für uns alle unverzichtbar. Am MBI als einem Institut der experimentellen physikalischen Forschung kommen unterschiedliche Methoden und Technologien zum Einsatz, die hohe Sicherheitsanforderungen stellen und mit spezifischen Sicherheitsvorkehrungen verbunden sind. Darüber hinaus erfordert unsere Arbeit den regelmäßigen Umgang mit Gefahrstoffen. Die Sicherheit der Arbeitsplätze am MBI wird laufend durch den TÜV Rheinland überprüft, der eng mit unserem Ausschuss für Arbeitssicherheit (ASA) zusammenarbeitet. Eine der wichtigsten Maßnahmen ist dabei die breite Vermittlung von Sicherheitskenntnissen und Schulung im Umgang mit gefährlichen Gütern und komplexen Technologien.

Das Direktorium hat den an Ostern geschehenen Laborunfall zum Anlass genommen, die Arbeitssicherheit am MBI zu analysieren und weiter zu verbessern. Nach Konsultationen mit externen Sachverständigen, dem ASA und den Projektleitern wurde eine Reihe von zeitnahen Maßnahmen beschlossen. Neu eingeführt wurde ein Genehmigungsverfahren für experimentelle Laborarbeiten an Wochenenden und Feiertagen, um über solche Arbeiten vorab informiert zu sein und die Präsenz von mindestens zwei MitarbeiterInnen sicherzustellen. Gegenwärtig werden alle im MBI vorhandenen Druckminderer für Gasflaschen erfasst und mit einer Kennzeichnung des zulässigen Druckbereichs versehen. Die Versorgung mit Gasflaschen wird in naher Zukunft zentralisiert und dem Chemikalienlager zugeordnet. Die Sicherheitsschulung neu eingestellter MitarbeiterInnen wird ebenso erweitert wie die in den Abteilungen und Projektgruppen stattfindenden regelmäßigen Schulungen.

Der Erfolg all dieser Maßnahmen, d.h. eine noch höhere Sicherheit am Arbeitsplatz hängt von Ihrer aktiven Beteiligung ab. Ich möchte Sie ausdrücklich ermutigen, Sicherheitsaspekte in Ihrem Arbeitsumfeld zu benennen und wenn nötig mit Ihren KollegInnen und Vorgesetzten zu diskutieren. Sprechen Sie auch den ASA-Vorsitzenden Alexander Grimm und/oder das Direktorium direkt an, wenn Sie Probleme sehen oder Änderungs- und Verbesserungsvorschläge haben. Sicherheit am Arbeitsplatz erfordert, dass wir alle uns aktiv darum kümmern.

Für das Direktorium:  
Thomas Elsässer

## Editorial

Dear Members of the MBI,

Safety and health at work are indispensable for all of us. MBI's research in experimental physics requires a combination of different methods and technologies which make great demands on safety and are connected with specific safety measures. Moreover, our work includes the use of hazardous materials. The safety of the working environment at MBI is continuously being checked by the TÜV Rheinland which collaborates closely with MBI's Board for Safety at Work (ASA). In this context, detailed safety instructions and safety training for dealing with hazardous materials and complex technologies represent most important measures.

After the lab accident that happened at Easter, the Board of Directors has taken the initiative to analyze and further improve work safety at MBI. As a result of consultation with external experts, the ASA and the project leaders, the directors have decided to implement a number of measures. The recently introduced approval procedure for experimental lab work on weekends and holidays serves for being informed about such activities in advance and for making sure that at least two MBI members are present. Presently, all pressure regulators for gas bottles are being registered and marked with a label giving their pressure range. In the near future, the supply with gas bottles will be centralized as part of the storage for chemicals. The safety training for new MBI members and the regular training in the departments and project groups will be enhanced and their content enlarged.

The success of all such measures, i.e., an even higher safety at work, depends on your active participation. I would like to encourage you to identify safety aspects in your working environment and – if appropriate – to discuss them with your colleagues and supervisors. Please don't hesitate to contact the Chairman of ASA Alexander Grimm, and/or the directors in case you see problems or have suggestions for changes and improvements. Safety at work requires that all of us take care.

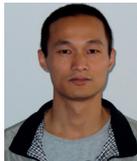
For the Board of Directors:  
Thomas Elsaesser

# MBI Interner Newsletter

## Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts  
(Stand: 19.05.2015)

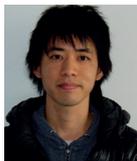
Huabao Cao  
Gastwissenschaftler B3  
Tel. n.n.  
E-Mail: [n.n.@mbi-berlin.de](mailto:n.n.@mbi-berlin.de)  
Beginn 10.05.2015



Vladimir Chvykov  
Gastwissenschaftler B3  
Tel. n.n.  
E-Mail: [n.n.@mbi-berlin.de](mailto:n.n.@mbi-berlin.de)  
Beginn 08.05.2015



Dr. Keisuke Shinokita  
Gastwissenschaftler C3  
Tel. 1474  
E-Mail: [shinok@mbi-berlin.de](mailto:shinok@mbi-berlin.de)  
Beginn 01.05.2015



Fabian Dahms  
Doktorand C1  
Tel. 1496  
E-Mail: [dahms@mbi-berlin.de](mailto:dahms@mbi-berlin.de)  
Beginn 15.05.2015



Nils Monserud  
Doktorand A2  
Tel.  
E-Mail: [n.n.@mbi-berlin.de](mailto:n.n.@mbi-berlin.de)  
Beginn 15.04.2015



Sebastian Raabe  
Doktorand A2  
Tel. 1251  
E-Mail: [sraabe@mbi-berlin.de](mailto:sraabe@mbi-berlin.de)  
Beginn 01.03.2015



Daniel Reiche  
Doktorand A1  
Tel. 1213  
E-Mail: [reiche@mbi-berlin.de](mailto:reiche@mbi-berlin.de)  
Beginn 01.04.2015



Annegret Noack  
Auszubildende Vw  
Tel. 1512  
E-Mail: [?.@mbi-berlin.de](mailto:?.@mbi-berlin.de)  
Beginn 01.05.2015



Ausgeschiedene:  
(Stand 30.01.2015)

Dr. Alexandria Anderson  
Dr. Jyotsana Gupta  
Andrey Boyko  
Benjamin Freyer  
Dr. Ondrej Novak  
Karl Mildner-Spindler  
Andreas Schmidt  
Radoslaw Mohrhardt  
Kathrein Baurich  
Brigitte Steinert  
Marcel Herzlieb  
Stefan König  
Stephan Marschner

Wissenschaftlerin A3  
Wissenschaftlerin C3  
Gastwissenschaftler A3  
Gastwissenschaftler C3  
Gastwissenschaftler A3  
Doktorand B2  
Doktorand C2  
Diplomand A1  
Technikerin A2  
Technikerin C1  
stud. u. wiss. Hilfskraft  
stud. u. wiss. Hilfskraft  
stud. u. wiss. Hilfskraft

## Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/ Master- & Diplomarbeiten

### F. Di Trapani

Tm:LuVO4 and Tm,Ho:KLu(WO4)2, new efficient crystals for continuous wave and tunable laser operation  
Masterarbeit (2014) University of Pavia, Italy Pavia

### A. von Veltheim

Noble Gas Dimers in Strong Laser Fields  
Dissertation (2015) Technische Universität Berlin

## Herzlichen Glückwunsch zur abgeschlossenen Ausbildung

Wir gratulieren Marc Möbis, Abteilung C2 und Adis Kondzic, Abteilung B1 zu ihrer erfolgreich abgeschlossenen Berufsausbildung. Wir wünschen beiden Absolventen alles Gute auf ihrem weiteren beruflichen und privaten Lebensweg!



# MBI Interner Newsletter

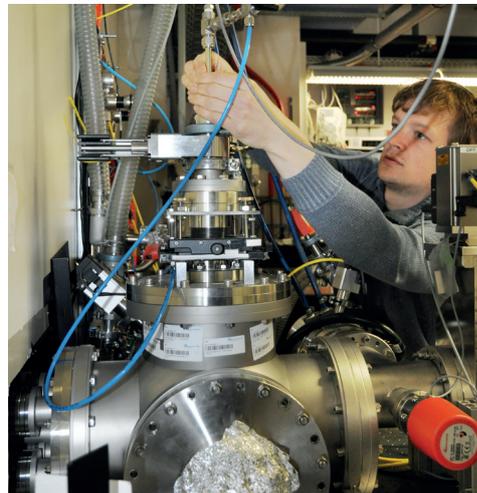
## Preis

### Rubicon Forschungsstipendium für Geert Reitsma

Die niederländische Organisation für wissenschaftliche Forschung (NWO - The Netherlands Organisation for Scientific Research) zeichnet den Wissenschaftler Geert Reitsma mit dem renommierten *Rubicon Grant* für sein Forschungsvorhaben „Aufzeichnung von Biomolekülen in Aktion“ (Original: *Filming biomolecules in action*) aus. Mit diesem Preis wird er seine wissenschaftliche Forschung am Max-Born-Institut fortsetzen.

Viele Abläufe im täglichen Leben stützen sich auf ultraschnelle Bewegungen komplexer Moleküle, wie z.B. in diesem Augenblick beim Lesen dieser Mitteilung. Wenn das Retinalmolekül in unserer Netzhaut Licht absorbiert, ändert sich dabei die Molekularstruktur ultraschnell. Diese Änderung induziert letztendlich ein elektrisches Signal in unserem Gehirn: Wir sehen das Licht. Der grundlegende Prozess ist mittlerweile sehr gut erforscht und nachvollziehbar. Die der zugrundeliegende Neuordnung von Elektronen und Kernen in den Molekülen ist jedoch noch weitgehend unbekannt. Um das Verständnis über die Dynamik von Biomolekülen zu erweitern, erscheinen Filmaufnahmen als sehr geeignete Methode. Die bei der Erfassung der Elektronen- und Kernbewegungen notwendige hohe Bildfrequenz erfordert eine sehr weit fortgeschrittene ultraschnelle Lasertechnik, die Reitsma am Max-Born-Institut zur Verfügung steht

Dr. Reitsma promovierte am 1. Dezember 2014 an der Universität in Groningen und führte seine Forschungen am „Zernike Institute for Advanced Materials, Quantum Interactions and Structural Dynamics Unit“, durch. Die niederländische Organisation für wissenschaftliche Forschung (NWO) ist der wichtigste Wissenschaftsförderer der Niederlande. Sie verfolgt das Ziel, Qualität und Innovation der wissenschaftlichen Forschung zu stärken. Das von NWO getragene Rubicon Programm ermöglicht jährlich 60 Postdocs Erfahrungen in ausländischen Top-Forschungseinrichtungen zu gewinnen und gilt als wichtiger Karrieresprung in deren wissenschaftlichen Laufbahn.



## Prize

### Rubicon fellowship for Geert Reitsma

The Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO) rewards MBI researcher Geert Reitsma a prestigious *Rubicon Grant* for his proposal „*Filming biomolecules in action*“. With this grant he will continue his career at the MBI. Many processes of life rely on ultrafast movements of complex molecules. One example for an ultrafast movement happens right now while you are reading these lines: When retinal in our eye absorbs light, the molecular structure changes extremely fast. This change ultimately induces an electrical signal transduced to the brain with the result that we see the light. The general sequence of this process is very well understood. However, the underlying electronic and nuclear rearrangement of the molecule is not adequately understood. The ideal way to get this understanding is filming such a process. As the process is very fast, the frame rate needs to be very high to capture individual rearrangements. One prerequisite to obtain this frame rate is very advanced ultrafast laser technology. Here, at the MBI, Reitsma will have access to the most advanced laser systems allowing him to produce these movies of biomolecules in action.

Dr. Reitsma did his PhD research in the Quantum Interactions and Structural Dynamics group at the Zernike Institute for Advanced Materials in Groningen (NL). He received his PhD from the University of Groningen on Dec. 1, 2014. The Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO) is the most important science-funding body in the Netherlands and aims to ensure quality and innovation in science. Facilitated by NWO's Rubicon programme, 60 PhD graduates per year will be conducting research at top foreign institutes. Through Rubicon, NWO gives talented young scientists the opportunity to gain international research experience as a stepping stone to a scientific career.

Weitere Informationen/More information: NWO's Rubicon programme: <http://www.nwo.nl/en/news-and-events/news/2015/>

Contact: Geert Reitsma, Tel. 1248

# MBI Interner Newsletter

## Betriebsrat

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

der Betriebsrat möchte Sie über ein wichtiges Urteil des Landessozialgerichts (LSG) Hessen informieren, das die gesetzliche Unfallversicherung der Berufsgenossenschaft während der Pausenzeiten betrifft.

Dem sei vorausgeschickt, dass die Beschäftigten des Instituts mit Arbeits-, Ausbildungs- oder Praktikumsverträgen über die Verwaltungs-Berufsgenossenschaft (VBG) gesetzlich unfallversichert sind. Der Versicherungsschutz umfasst auch den direkten Weg zur Arbeitsstelle und zurück sowie die in den Arbeitspausen zurückgelegten Wege. Hierbei gibt es allerdings Einschränkungen, wie anhand des eingangs erwähnten Urteils deutlich wird.

In dem vom LSG Hessen im März 2015 verhandelten Fall ging es um Folgendes: Eine Arbeitnehmerin, die während der Mittagspause gestürzt war und sich dabei eine Halsmarkquetschung zugezogen hatte, wollte eine Entschädigung von der Berufsgenossenschaft (BG) erstreiten. Die BG lehnte dies mit der Begründung ab, die Arbeitnehmerin habe sich zum Unfallzeitpunkt auf dem Weg zu einer Reinigung befunden, um dort Kleidungsstücke abzuholen. Somit habe zum Unfallzeitpunkt keine versicherte Tätigkeit stattgefunden, vielmehr sei die Arbeitnehmerin einer rein privaten Verrichtung nachgegangen. So war dies auch wenige Tage nach dem Unfall protokolliert worden.

Das Gericht folgte der Argumentation der BG. Es gelang der Arbeitnehmerin nicht, das Gericht zweifelsfrei davon zu überzeugen, dass der eigentliche Zweck ihres Weges die „Nahrungsaufnahme“ gewesen sei. Eine Revision des Urteils wurde nicht zugelassen. Für die Praxis bedeutet dies, dass zurückgelegte Wege während der Pausenzeiten nur dann durch die Unfallversicherung abgedeckt sind, wenn sie die „Nahrungsaufnahme“ direkt zum Ziel haben.

*Ein wichtiger Hinweis zum Abschluss:* Wir haben dieses rechtliche Thema gewissenhaft recherchiert, können jedoch, da der Betriebsrat ehrenamtlich tätig ist und aus juristischen Laien besteht, keine rechtsverbindliche Gewähr übernehmen.

Viele Grüße  
Ihr Betriebsrat

## Works Council

Dear colleagues,

The works council would like to inform you about a most important decision by the Landessozialgericht LSG Hessen (National Social Court) regarding statutory accident insurance during breaks by the „Berufsgenossenschaft“ (BG).

The Institute's staff is insured by law against accidents through the Verwaltungs-Berufsgenossenschaft (VBG). This applies to staff members of the Institute who work here as employees, apprentices or trainees. The insurance covers direct commuting to and from the workplace as well as the direct distances covered during breaks. However, there are restrictions to the above mentioned decision.

The case that was brought to trial at LSG Hessen in March 2015 dealt with the following situation: An employee suffering from a bruised cervical spinal cord which was injured during her lunch break claimed for compensation. However, the BG argued that the employee was on her way to pick up some clothes from the dry cleaner at the time of the accident. At that moment there was no insured activity, but rather did the employee pursue a purely private activity. This was also stated a few days later in the accident report.

The Court followed the reasoning of the BG as the employee could not fully convince the Court of the fact that her primary reason was to get something to eat. No appeal was permitted. In other words, during breaks the statutory accident insurance covers only direct distances travelled to get something to eat.

*Important note:* All legal information and data has been carefully and thoroughly researched. However, as the works council works on a voluntary basis and has no legal background we cannot assume any legally binding guarantee.

Kind regards,  
Your Works Council

Quelle: Hess. LSG, Urteil vom 24.03.2015 - Aktenzeichen: AZ L 3 U 225/10 - PM des Hess. LSG Nr. 5/15 vom 24.03.2015

# MBI Interner Newsletter

## Forschungsergebnisse

### Schnelles Gold

Ein neuer Mechanismus in der Laser-Plasma-Beschleunigung wurde für Schwerionen entdeckt, der mittels Coulomb-Explosion eine signifikante Zunahme der kinetischen Ionenenergie bewirkt.

Wir alle sind aus Sternenstaub gemacht - dieses poetische Bild enthält eine Menge an (noch) unbekannter, spannender Physik, die der Dichter vielleicht eigentlich nicht erzählen wollte. Unter den Top 10 der ungeklärten Fragen der Physik, rangiert auch die Frage nach der Entstehung der schweren Elemente - Bestandteil des Sternenstaubs. Einen tiefen Einblick in das Innere der schweren Teilchen und ihrer Synthese kann man bisher nur erhaschen, wenn sie bei extrem hohen Geschwindigkeiten aufeinanderprallen und man die dadurch entstandenen Fragmente ihrer Atomkerne analysiert. Nicht nur die Kernphysiker haben Interesse an schnellen Schwerionen, sondern sie sind auch in der Materialforschung und der Medizinforschung gefragt.

Produziert werden diese Ionenstrahlen mit Teilchenbeschleunigern, die zu den größten und komplexesten Maschinen der Welt gehören. Das motiviert natürlich auch die Suche nach neuen technischen Konzepten oder ihre Verbesserung. Ein alternativer Weg zur konventionellen Beschleunigertechnologie ist die Teilchenbeschleunigung durch ein Laser erzeugtes Plasma. Dazu benötigt man Laserintensitäten im sogenannten relativistischen Bereich, hier beschleunigt ein intensiver Laserpuls Elektronen bis fast auf Lichtgeschwindigkeit. Die Laser-Plasma Interaktion ist dabei durch relativistische Effekte der Elektronen-Photonen Wechselwirkung bestimmt. Ein einzelner Laserpuls erzeugt in einem räumlich sehr begrenzten Plasma enorm hohe, gerichtete Feldstärken in der Größenordnung von bis zu einigen Megavolt pro Mikrometer. In diesen Feldern können geladene Teilchen auf einer relativ kurzen Wegstrecke auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigt werden, so z.B. auch Goldionen.

Die Herausforderung bei der Schwerionenbeschleunigung ergibt sich direkt aus einem Grundprinzip: Ionen werden proportional zu ihrem Ladungs/Masse ( $Z/A$ ) beschleunigt, das zu höheren kinetische Energien ( $\sim \text{MeV/u}$ ) für leichtere Elemente führt, da es schwierig ist hohe Ionisationstufen bei schweren Elementen zu erreichen. Genau diesen Punkt konnten wir durch freistehende, ultradünne Goldfolien überwinden: Sie lieferten einen unerwarteten hohen Grad und eine spezifische Verteilung der Ionisation für das schwere Material ( $Z > 40$  für Gold), so dass eine enorme, abstoßende Ladung wirkt und zur Beschleunigung der schweren Ionen über eine Coulomb Explosion führt. Verglichen zu vorangegangenen Experimenten

## Research Highlights

### Fast Gold

A new laser plasma acceleration scheme for heavy ions is found, leading to a significant boost of their kinetic energy by Coulomb explosion.

We are all made from stardust - this phrase contains a lot of unknown but exciting physics, which the poem writer probably did not want to tell. Within this context the top ten ranking of open problems in physics lists the question related to the synthesis of the heavy elements - stardust. To gain a deeper inside, from an experimental point of view, heavy ions with very high velocities are needed. The collision of heavy particles at high kinetic energy enables the study of the resulting reaction products. Beyond basic research, beams or pulsed beams of heavy ions are in the focus of applications in solid state physics as well as in bio-medical areas.

Such beams are produced with particle accelerators which belong to the biggest and most complex machines for research today. In order to make things more compact there is a strong motivation for searching new concepts and technologies in particle acceleration. One approach is acceleration by plasma created by laser pulses at relativistic intensities. The term relativistic indicates here that the intense light field causes an electron motion close to the speed of light and hence relativistic effects determine the properties of the laser-plasma interaction. Enormous fields with a strength of the order of megavolts per micrometer can be created in a well-defined direction leading to fast (some ten percent of light velocity) light and heavy ions. Due to the extreme acceleration these ion beams have some striking characteristics which are studied and applied in experiments.

The challenge of heavy ion acceleration results directly from basic principles: Ions are accelerated proportional to their charge to mass ratio  $Z/A$  leading to higher velocity for lighter elements. Laser plasma acceleration of really heavy ions e.g. gold, had been quite inefficient for this reason as very high ionization degrees are difficult to obtain. This limitation is overcome in our experiments with freestanding gold foils of nanometer thickness: which provide a so far unexpected high degree of ionization and specific distribution of the heavy material ( $Z > 40+$  for Gold ions). Compared to former experiments we achieved kinetic energies of the gold ions with 1 MeV per nucleon with an order of magnitude less laser energy.

Common laser plasma driven acceleration models assume an averaged degree of ionization, which follows with a fixed, spatially uniform electron density. From our theoretical

# MBI Interner Newsletter

konnten wir kinetische Energien der Goldionen mit 1 MeV pro Nukleon mit einer Ordnung geringerer Laserenergie erzeugen.

Bisher übliche Laser Plasma Beschleunigungsmodelle nehmen eine gemittelte Ionisierung an, aus der eine fixierte räumlich uniforme Elektronendichte folgt. Unsere theoretischen Analysen der experimentellen Resultate (siehe Abb.) zeigen eine schichtweise unterschiedliche Ionisierung der Targetfolie, wobei Atome mit der höchsten Ionisierung sich an den Rändern der Folien befinden. Dadurch wird dort eine extrem hohe Raumladung erzeugt - die abstoßend auf die stark positiv geladenen, schweren Ionen wirkt - und diese zusätzlich beschleunigt.

Extrapoliert man unsere Erkenntnisse in den Parameterbereich für ein richtiges Kollisionsexperiment mit schnellen schweren Ionen, werden Femtosekundenlaser mit Pulsenergien von 100 J benötigt.

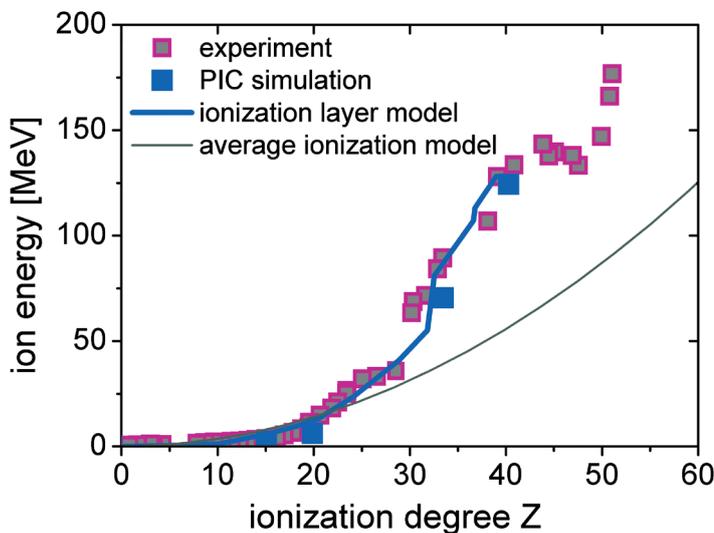
considerations and simulations we recognized, that the obtained high kinetic energies of the heavy ions are not consistent with an average ionization. Instead, we found for the ultra-thin targets a spatially varying degree of the ionization, with the highest degree of ionization at the target boundaries (found by simulation - cf. Fig.) - where it greatly enhances the electrical field and thus the force driving the ion acceleration.

Extrapolation of our results envisions the study of nuclear processes if heavy ions with adequate kinetic energies will be produced by using femtosecond lasers with 100 Joule pulse energy.

## Original publication: Physical Review Letters:

<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.114.124801>

Full citation: J. Braenzel, A.A. Andreev, K. Platonov, M. Klingsporn, L. Ehrentraut, W. Sandner, M. Schnuerer, „Coulomb-Driven Energy Boost of Heavy Ions for Laser-Plasma Acceleration“, Physical Review Letters 114, 124801 (2015)



**Fig. 1:**

Laser (1.3J @ 35 fs) irradiated 14 nm thick gold foils. The picture shows dependence of maximal ion energy on its ionization energy - as the experiment delivered (pink squares). We found good agreement with the 2D-PIC simulation - blue squares and with the prediction of our new theoretical model - blue line in contrast to the established, old model - black line

**Abb. 1:**

Der Laserpuls (1.3 J @ 35f) wird auf eine 14nm dicke Goldfolie fokussiert. Das Bild zeigt die maximale Ionenenergie in Abhängigkeit ihrer Ionisationsstufe - wie sie im Experiment gemessen wurden (pinke Quadrate). Das Bild zeigt darüber hinaus die gute Übereinstimmung mit unserer 2D-PIC Simulation (schwarze Quadrate) - wie auch einen Vergleich zwischen der Voraussage des alten theoretischen Modells (schwarze Linie) - und dem von uns neu entwickelten Modell (blaue Linie).

Contact/Kontakt: Julia Braenzel, Tel. 1318; Matthias Schnuerer, Tel. 1315

# MBI Interner Newsletter

## Forschungsergebnisse

### Klassisch oder nicht? Physik der Nanoplasmen

Die Wechselwirkung von intensiven Laserpulsen mit Partikeln auf einer Nanometer-Skala resultiert in der Erzeugung eines expandierenden Nanoplasmas. In der Vergangenheit wurde die Dynamik eines Nanoplasmas typischerweise durch klassische Phänomene wie die thermische Emission von Elektronen beschrieben. Im Gegensatz dazu demonstriert eine neue Studie über die Wechselwirkung von intensiven nah-infraroten (NIR) Laserpulsen mit molekularen Sauerstoff-Clustern, dass Phänomene eine wichtige Rolle spielen, die nur quantenmechanisch beschrieben werden können. Zum ersten Mal wurden nun ein Beweis dafür gefunden, dass autoionisierende Zustände in Nanoplasmen auf effiziente Weise entstehen. Autoionisation dieser sogenannten superangeregten Zustände in atomarem Sauerstoff kann direkt auf einer Nanosekunden-Zeitskala beobachtet werden, während für Prozesse, die auf kürzeren Zeitskalen stattfinden, indirekte Spuren sichtbar sind. Autoionisation wird in verschiedenen Clustern beobachtet, und es wird erwartet, dass diese Prozesse auch wichtig sind für die Wechselwirkung von endlichen Systemen mit intensiven extrem-ultravioletten (XUV) und Röntgenpulsen von neuartigen Freie-Elektronen Lasern.

Als Folge der Wechselwirkung von intensiven Laserpulsen mit Clustern zeigen die gemessenen Elektronenspektren typischerweise eine kontinuierliche Verteilung. In der Vergangenheit führte das Fehlen von Spuren diskreter Zustände zu der Schlussfolgerung, dass die Dynamiken von geladenen Partikeln während der Cluster-Expansion gut durch ein vollständig klassisches Verhalten beschrieben werden können. Eine Auswirkung davon ist, dass Simulationen, die die Wechselwirkung von intensiven Lasern mit Clustern, Nanopartikeln oder großen Molekülen modellieren, oft auf quasiklassische Ansätze zurückgreifen. Mit dem Aufkommen neuer Laserquellen und zeitaufgelöster Techniken innerhalb des letzten Jahres begann dieses Bild zu wackeln. Kürzlich wurde über eine effiziente Erzeugung von angeregten Atomen in Nanoplasmen berichtet, die durch Elektronen-Ionen Rekombination ausgelöst wird. Wenn ein Atom mit 2 Elektronen in angeregten Zuständen entsteht, kann es durch Elektronen-Korrelation zerfallen, wobei ein Elektron in das Kontinuum emittiert wird, während das 2. Elektron in einen niedrigeren gebundenen Zustand relaxiert. Da jedoch die Elektronen, die in einem solchen Autoionisations-Prozess emittiert werden, kinetische Energie mit der Cluster-Umgebung austauschen, waren diese bisher nicht in Experimenten beobachtet worden. In einer Kollaboration angeführt von Wissenschaftlern des Max-Born-Instituts wurde nun über den ersten Beweis für Autoionisation als Folge der Wechselwirkung zwischen intensiven NIR-Laserpulsen und Clustern berichtet. In der aktuellen Ausgabe von Physical Review Letters [114, 123002

## Research Highlights

### Classical or not? Physics of nanoplasmas

The interaction of an intense laser pulse with a nanometer-scale particle results in the generation of an expanding nanoplasma. In the past, nanoplasma dynamics were typically described by classical phenomena, like the thermal emission of electrons. In contrast, a new study on the interaction of intense near-infrared (NIR) laser pulses with molecular oxygen clusters now demonstrates that phenomena, which can only be described quantummechanically, play an important role. For the first time, evidence of efficient formation of autoionizing states in nanoplasmas is found. Autoionization of so called superexcited states of atomic oxygen is directly observed on a nanosecond time scale, whereas indirect signatures are visible for decay processes occurring on shorter time scales. Autoionization is found to take place in various systems and is expected to be important also in the interaction of finite systems with intense extreme-ultraviolet (XUV) and X-ray pulses from novel free-electron laser sources.

Following the interaction of intense NIR laser pulses with clusters, the recorded electron spectra typically show a smooth distribution. In the past, the absence of discrete state signatures in these spectra led to the conclusion that the dynamics of charged particles during the cluster expansion can be well described by fully classical behavior. As a consequence, simulations that model the interaction of intense lasers with clusters, nanoparticles or large molecules, often make use of quasiclassical approaches. With the advent of novel laser sources and time-resolved techniques during the last year, this picture began to falter. Recently, extensive formation of excited atoms in nanoplasmas driven by electron-ion recombination processes was reported. When an atom with 2 electrons in excited states is formed, it may decay via an electron correlation effect, where one electron is released into the continuum, while the second electron relaxes to a lower bound state. However, since the electrons emitted via such autoionization processes exchange kinetic energy with the cluster environment, they had not been observed in experiments so far.

In a collaboration led by scientists from the Max-Born-Institut, the first evidence of autoionization following intense NIR laser-cluster interactions is now reported. In the current issues of Physical Review Letters [114, 123002 (2015)] Bernd Schuette, Marc Vrakking and Arnaud Rouzée, and their colleagues Jan Lahl, Tim Oelze and Maria Krikunova from the TU Berlin present results obtained from oxygen clusters. This system was chosen, because oxygen atoms have previously been shown to exhibit long-lived autoionizing states. In the present study, clear peaks were observed in the electron spectrum from oxygen clusters ionized by intense NIR pulses (Fig. 1). These peaks could be assigned to well-known autoionizing states, and it was shown that they decay on a nanosecond time

# MBI Interner Newsletter

(2015)] präsentieren Bernd Schütte, Marc Vrakking und Arnaud Rouzée sowie ihre Kollegen Jan Lahl, Tim Oelze und Maria Krikunova von der TU Berlin die Ergebnisse, die in Sauerstoff-Clustern erzielt wurden. Dieses System wurde gewählt, weil bereits bekannt war, dass Sauerstoff-Atome langlebige autoionisierende Zustände aufweisen. In der aktuellen Studie wurden deutliche Peaks im Elektronen-Spektrum von Sauerstoff-Clustern beobachtet, die mit intensiven NIR-Pulsen ionisiert wurden (Abb. 1). Diese Peaks konnten gut bekannten autoionisierenden Zuständen zugeordnet werden, und es wurde gezeigt, dass sie auf einer Nanosekunden-Zeitskala zerfallen, wenn sich der Cluster bereits deutlich ausgedehnt hat. Deshalb war der Einfluss der Umgebung auf die Elektronen, die als Folge der Autoionisation emittiert wurden, vernachlässigbar. Die beobachteten Beiträge der Autoionisation waren sehr empfindlich bezüglich der Intensität des NIR-Laserpulses. Bei größeren Intensitäten wurden die Autoionisations-Peaks verschmiert, waren jedoch immer noch sichtbar.

Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass Autoionisation in vielen Experimenten eine wichtige Rolle spielt, in denen die Wechselwirkung von intensiven Laserpulsen mit Partikeln auf einer Nanometer-Skala untersucht wird, selbst dann, wenn diese Prozesse nicht direkt im Elektronen-Spektrum beobachtet werden können. Bereits zuvor wurde gezeigt, dass die beobachtete Nanoplasma-Dynamik als Folge intensiver XUV und NIR Ionisation von Clustern ähnlich sind, weshalb erwartet wird, dass die aktuellen Ergebnisse auch eine hohe Relevanz für Experimente an neuartigen Freie-Elektronen Lasern haben. Die experimentellen Funde der Autoionisation sind desweiteren wichtig, um theoretische Modelle von Nanoplasmen in der Zukunft zu verbessern und so ein besseres Verständnis über die zugrundeliegenden mikroskopischen Prozesse zu gewinnen.

scale, when the cluster has already significantly expanded. Therefore, the influence of the environment on the electrons emitted via autoionization was negligible. The observed autoionization contributions were found to be very sensitive on the intensity of the NIR laser pulse. At higher intensities, the autoionization peaks were blurred out, but still visible. These results indicate that autoionization plays an important role in many experiments that study the interaction of intense laser pulses with nanometer-scale systems, even when these processes cannot be directly observed in the electron spectrum. Previously, it was demonstrated that the observed nanoplasma dynamics following intense XUV and NIR ionization of clusters are similar, and therefore, the current results are expected to be highly relevant as well for experiments at novel free-electron lasers. The experimental findings of autoionization are also important for improving theoretical models of nanoplasmas in the future in order to gain a better understanding of the underlying microscopic processes.

The presented results demonstrate that a description of nanoplasma dynamics by classical approaches is insufficient. Quantum phenomena like autoionization play an important role during the expansion of clusters following the interaction with intense light pulses.

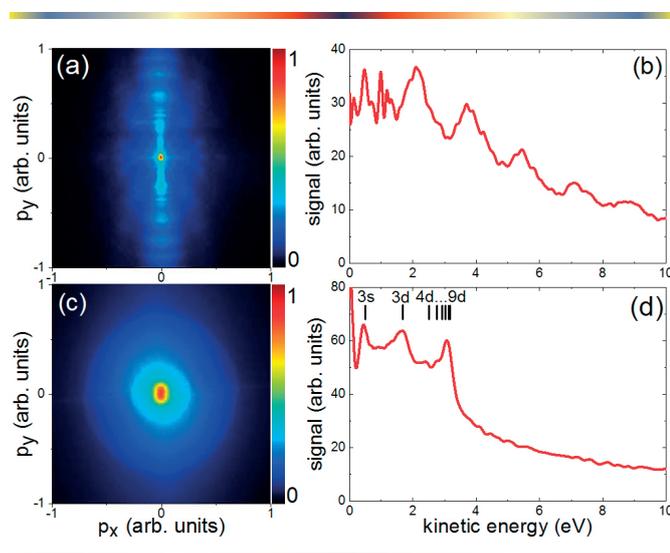
**Original publication:** Physical Review Letters

<http://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.114.123002>

Full citation:

Bernd Schütte, Jan Lahl, Tim Oelze, Maria Krikunova, Marc J. J. Vrakking and Arnaud Rouzée, „Efficient autoionization following intense laser-cluster interactions“, Physical Review Letters 114, 123002 (2015)

Contact: B. Schütte, M. Vrakking, A. Rouzée



**Fig. 1:** (a) Two-dimensional electron momentum map emitted from O<sub>2</sub> molecules, showing an anisotropic distribution of electrons peaked along (vertical) the NIR laser polarization. (b) In the corresponding kinetic energy spectrum, the observed peaks are attributed to above-threshold ionization and Freeman resonances. (c) The electron momentum map from O<sub>2</sub> clusters with an average size of 2400 molecules exhibits a much more isotropic behavior. (d) In the kinetic energy spectrum, three clear peaks emerge that are assigned to autoionization of superexcited atomic states.

**Abb. 1:** (a) Zweidimensionale Elektronen-Impulsabbildung emittiert von O<sub>2</sub> Molekülen, die eine anisotrope Verteilung der Elektronen mit einem Maximum in paralleler (vertikal) Richtung zur NIR Laser Polarisationsrichtung zeigt. (b) Im entsprechenden kinetischen Energie-Spektrum ist die beobachtete Peak-Struktur zurückzuführen auf Ionisation oberhalb des Schwellenwertes sowie Freeman-Resonanzen. (c) Die Elektronen-Impulsabbildung von O<sub>2</sub> Clustern mit einer durchschnittlichen Größe von 2400 Molekülen weist ein deutlich isotropes Verhalten auf. (d) Im Spektrum der kinetischen Energie tauchen 3 Peaks auf, die Autoionisations-Prozessen zugeordnet werden können als Folge des Zerfalls von superangeregten atomaren Zuständen.

# MBI Interner Newsletter

## Forschungsergebnisse

### Neue Einblicke in die Photophysik der DNA Base Thymin

DNA speichert unseren genetischen Code. Solare UV-Strahlung ist hinreichend hochenergetisch, um grundsätzlich Bindungen in der DNA zu brechen und damit DNA-Schäden zu verursachen. Doch obwohl DNA (z. B. in unseren Hautzellen) täglich intensiver UV-Bestrahlung durch die Sonne ausgesetzt ist, stellt sich die DNA als erstaunlich lichtstabil heraus. Es ist seit langem bekannt, dass dies durch Mechanismen zu erklären ist, die die elektronische Energie hocheffizient in andere Formen von Energie umwandeln, insbesondere in Wärme. Dabei spielen Schnittflächen der multidimensionalen Potentialhyperflächen, sogenannte konische Durchdringungen, zwischen den elektronisch angeregten Zuständen und dem elektronischen Grundzustand eine wichtige Rolle. Diese konischen Durchdringungen werden mit strukturellen Änderungen der Moleküle in Verbindung gebracht. Die genauen Wege zurück in den elektronischen Grundzustand sind Thema intensiver Forschung.

Obwohl die DNA ein Makromolekül mit mehreren Milliarden Atomen (im Falle menschlicher DNA) ist, lässt sie sich doch in nur wenige unterschiedliche strukturelle (und funktionale) Elemente einteilen: vier DNA Basen, ein Zuckerrest und eine Phosphatgruppe. Die Absorption von UV Licht findet ausschließlich in den DNA-Basen statt. Deshalb ist es ein üblicher Forschungsansatz, zunächst nur die Reaktion der DNA-Basen auf UV-Absorption zu untersuchen.

Ein Team aus Wissenschaftlern des MBI sowie der Universitäten Hokkaido und Hiroasaki in Japan hat nun erstmals die DNA-Base Thymin in wässriger Lösung mit Hilfe der zeitaufgelösten Photoelektronenspektroskopie untersucht und bestehende Vorstellungen zum Relaxationsprozess in dieser Base in Frage gestellt. Bisher wurde vermutet, dass ein signifikanter Anteil des angeregten Zustandes zunächst in einem dunklen  $\pi\pi^*$  Zustand verbleibt und nicht sofort über eine konische Durchdringung in den Grundzustand zurückkehrt. Dieser dunkle Zustand kann mit Hilfe optischer Spektroskopie (wie z. B. zeitaufgelöster Fluoreszenz oder zeitaufgelöster Absorption) nicht direkt beobachtet werden. Entsprechende Einschränkungen gibt es für die Photoelektronenspektroskopie allerdings nicht.

Im Zusammenspiel zwischen Experiment und Simulation konnten erstmals zwei verschiedene Reaktionswege

## Research Highlights

### New Insights into the photophysics of the DNA base thymine

DNA stores our genetic code. Solar UV radiation has sufficiently high energy to basically break bonds of the DNA and thus cause DNA damage. Although DNA (e. g. in our skin cells) is exposed to intense UV light irradiation, DNA proves to be surprisingly photostable. It is well established that this is due to efficient mechanisms that convert electronic energy into other forms of energy, in particular heat. An important role is played by so-called conical intersections between electronic excited potential energy surfaces and the ground state potential energy surface. These conical intersections are associated with structural changes of the molecules. The exact pathways back into the electronic ground state however are topic of intense research.

Although DNA is a macro molecule with billions of atoms (in case of human DNA), it can still be divided into only a few structural (and functional) elements: four DNA bases, a sugar moiety and a phosphate group. The absorption of UV light exclusively takes place in the DNA bases. For this reason it is a common scientific approach to investigate the UV response of DNA bases first.

A team of scientists from MBI and universities of Hokkaido and Hiroasaki in Japan have for the first time investigated the DNA base thymine in aqueous solution by time-resolved photoelectron spectroscopy and questioned existing ideas about the excited-state relaxation process in this base. So far it was supposed that a significant fraction of the excited-state population remains in a dark  $\pi\pi^*$  state instead of immediately returning to the ground state via a conical intersection. This dark state cannot be observed by optical spectroscopy (e. g. transient absorption or fluorescence upconversion) directly. Corresponding limitations however do not exist for photoelectron spectroscopy.

By combining experiment and simulation, for the first time two different relaxation pathways were identified. Both paths evolve in the first excited state ( $\pi\pi^*$ ). The faster reaction path is associated with a twist of the aromatic ring and leads to repopulation of the electronic ground state within 100 fs. The second path involves an out-of-plane motion of the carbonyl group, and the molecule returns to the ground state within 400 fs. The scientists did not find any indication for an important role of the second excited  $\pi\pi^*$  state and conclude that this state is not involved in the relaxation process.

# MBI Interner Newsletter

identifiziert werden. Beide Wege verlaufen im ersten angeregten ( $\pi\pi^*$ ) Zustand. Der schnellere Reaktionspfad ist mit einer Verdrillung des aromatischen Rings verknüpft und führt in etwa 100 fs zurück in den Grundzustand. Der zweite Weg verläuft über die Bewegung der Carbonylgruppe aus der Ringebene in ca. 400 fs zurück in den Grundzustand. Hinweise, dass der nächst höhere angeregte  $n\pi^*$  Zustand für die Relaxationsdynamik von Thymin eine wichtige Rolle spielt, fanden die Wissenschaftler nicht, woraus sie schlossen, dass dieser Zustand am Relaxationsprozess nicht beteiligt ist.

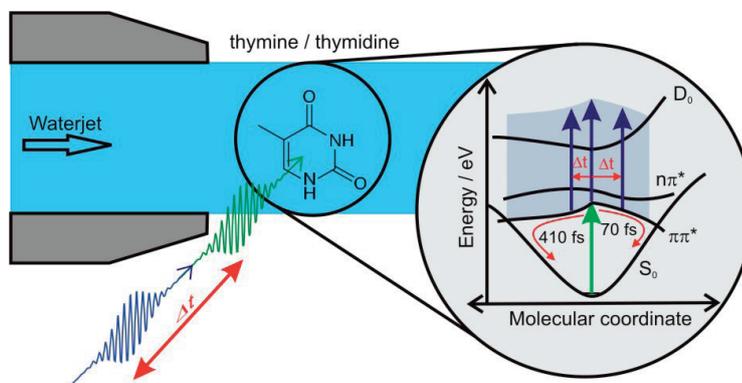
**Original publication** [JACS. DOI: 10.1021/ja511108u](https://doi.org/10.1021/ja511108u)

Franziska Buchner, Akira Nakayama, Shohei Yamazaki, Hans-Hermann Ritze, Andrea Lübcke „Excited-State relaxation of hydrated thymine and thymidine measured by liquid-jet photoelectron spectroscopy: experiment and simulation, JACS“

Contact: A. Lübcke, Tel 1207

## Abb 1:

Nach UV-Anregung erfolgt die Photoreaktion in Thymin entlang zweier unterschiedlicher Pfade: 1. der Verdrillung des aromatischen Ringes und 2. einer Bewegung der Carbonylgruppe aus der Ringebene. Im Widerspruch zur bestehenden Literatur scheint der  $n\pi^*$  Zustand keine Rolle zu spielen.



**Fig. 1:** After UV excitation thymine evolves on the ( $\pi\pi^*$ ) excited state surface along two different reaction coordinates. The first involves a twisting of the aromatic ring, the second an out-of-plane motion of the carbonyl group. In contrast to existing ideas, the  $n\pi^*$  state does not seem to be involved in the relaxation process.

# MBI Interner Newsletter

## Projekteinwerbungen

### Bereich A

**Projektbezeichnung:** PTKA-PFT FASULAM 02P14K502  
KMU-innovativ Verbundprojekt: Faserbasierte Strahlführung  
für Ultrakurzpuls-Laser in der Materialverarbeitung;  
TP Numerische Berechnungen  
**Laufzeit:** 01.04.2015 - 31.03.2017  
**Projektleiter:** A. Husakou  
**Geldgeber:** Bund PTKA

**Projektbezeichnung:** DFG DIP Grant Universität Mainz  
Deutsch-Israelische Projektkooperation  
Quantum phenomena in hybrid systems: Interfacing engineered  
materials and nanostructures with atomic systems  
Prof. Folman Ben-Gurion University Israel/  
Prof. Schmidt-Kaler J. Gutenberg-Universität Mainz  
1. Bewilligung bis 31.12.2017  
**Laufzeit:** 01.01.2015 - 31.12.2019  
**Projektleiter:** F. Intravaia  
**Geldgeber:** DFG

**Projektbezeichnung:** EU TDL2Ho 657630  
Think-disk lasers for 2-micron spectral range based on  
Ho-doped monoclinic double-tungstate epitaxial structures  
Individual Fellowships (IF)  
**Laufzeit:** 01.06.2015 - 31.05.2017  
**Projektleiter:** V. Petrov  
**Geldgeber:** EU

**Projektbezeichnung:** NWO Rubicon 2014/III  
Filming biomolecules in action  
Netherlands Organisation for Scientific Research Fellowship  
**Laufzeit:** 01.06.2015 - 31.05.2017  
**Projektleiter:** G. Reitsma  
**Geldgeber:** NWO

### Bereich C

**Projektbezeichnung:** DFG GR 1782/14-2  
Mikroaxicons für ultrakurze Wellenpakete II - MAXWELL II  
**Laufzeit:** 18.02.2015 - 28.02.2018  
**Projektleiter:** R. Grunwald  
**Geldgeber:** DFG

# MBI Interner Newsletter

## Termine - Save the date

Donnerstag, 17. September 2015

Wissenschaftlicher Beirat / Scientific Advisory Board

Samstag, 13. Juni 2015

Lange Nacht der Wissenschaften von 17 - 24 Uhr

