

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Inhalte

- Editorial
- Personalinformationen / Preise
- Betriebsrat
- Vereinbarkeit Beruf und Familie
- Projekteinwerbung
- Forschungsergebnisse/Research Highlights
- EDV/IT
- Allgemeines

Editorial

Liebe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter,

nach einer hoffentlich erholsamen Sommerpause erwarten Sie in den nächsten Wochen zwei wichtige und spannende Ereignisse. Das für Ende August geplante wissenschaftliche Symposium des MBI findet zum dritten Mal statt und dient neben der Information über die laufende Forschung vor allem der Diskussion wissenschaftlicher, technischer und organisatorischer Fragen. Gut informiert zu sein, Fragen zu stellen und sich aktiv zu beteiligen ist für uns alle wichtig, nur so kann sich das MBI weiterentwickeln und seinen erfolgreichen Kurs fortsetzen.

Im Rahmen der Sitzung des wissenschaftlichen Beirats wird dann am 25./26.09.2016 ein Audit gemäß den Regeln der Leibniz-Gemeinschaft stattfinden. Das Audit stellt eine Zwischenevaluierung durch den Beirat dar, bei der die Zukunftsstrategie des Instituts und seine Leistungen im Zeitraum von 2013 bis 2016 bewertet werden. Grundlage des Verfahrens ist der Auditbericht, den die Direktoren und Misha Ivanov in den letzten Monaten in Abstimmung mit den Projektleitern verfasst haben. Dieses Dokument beschreibt die Weiterentwicklung der bei der Evaluierung 2012 vorgelegten Strategie und berücksichtigt natürlich die Neuausrichtung des Bereichs B und die Einrichtung der Theorieabteilung. Letztere ist mittlerweile auch von administrativer Seite weitgehend abgeschlossen. Der Beirat wird nach dem Audit einen Bewertungsbericht vorlegen, der an das Kuratorium des Forschungsverbundes geht. Die Direktoren, Abteilungs- und Projektleiter stehen für weitergehende Fragen zum Audit gern zur Verfügung.

Es wäre schön, wenn wir im Vorfeld dieses wichtigen Ereignisses noch ein paar Hausaufgaben erledigen könnten. Ein Dauerbrenner ist die laufende Aktualisierung der MBI-Webseite, die doch einiges an (sehr) veralteter Information enthält. Gleichzeitig sollten die angebotenen neuen Elemente, etwa die persönlichen Seiten von Wissenschaftlern, auch wirklich genutzt werden. Eines sollte klar sein: Das Audit ist ein Training für die nächste Evaluierung, und die kommt mit absoluter Sicherheit.

Für das Direktorium:
Thomas Elsässer

Editorial

Dear Members of the MBI,

After a hopefully most recreative summer break you can look forward to two important and exciting events in the near future. At the end of August, the MBI scientific symposium will take place for the third time. This meeting serves for informing about MBI's current research and, in particular, for discussing scientific, technical, and organizational issues. To be well informed, to ask questions, and to participate actively is important for all of us and for a successful future development of the institute.

A scientific audit following the rules of the Leibniz Association will be held during the meeting of the Scientific Advisory Board (SAB) on September 25 and 26, 2016. The audit represents an evaluation by the SAB which assesses, in between two regular Leibniz evaluations, the future strategy of MBI and its performance in the period from 2013 to 2016. The audit will be based on a report which the directors and Misha Ivanov have written over the past few months, in consultation with the project leaders. This document describes the future development of the strategy MBI has presented for the evaluation 2012, taking into account the new research areas of division B and the recent establishment of the theory department. The latter has mainly been completed, also from the administrative viewpoint. After the audit, the SAB will present a written review and this report will go to the Board of Trustees of the Forschungsverbund. The directors, department heads, and project leaders will be happy to answer your questions regarding the audit.

It would be nice if we could do some homework before the audit. An ever-present topic is the continuous update of the MBI webpage which presently contains quite an amount of (very) outdated material. In parallel, the new elements such as the personal webpages of scientists should be implemented. Please note: The audit is a training for the next evaluation which will come for sure.

For the Board of Directors:
Thomas Elsaesser

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts
(Stand: 22.08.2016 - alphabetische Reihenfolge)

Christin Ebert
stud./wiss. Hilfskraft B4
Tel. 1337
E-Mail: ebert@mbi-berlin.de
Beginn: 01.07.2016



Esmerando Escoto
Doktorand C2
Tel. 1448
E-Mail: escoto@mbi-berlin.de
Beginn: 01.07.2016



Doayuan Ji
Praktikant B1
Tel. 1318
E-Mail: ji@mbi-berlin.de
Beginn: 04.07.2016



Nadia Kichler
Gastwissenschaftlerin A2
Tel. 1246
E-Mail: kichler@mbi-berlin.de
Beginn: 27.04.2016



Carlo Kleine
Praktikant A3
Tel. 1275
E-Mail: kleine@mbi-berlin.de
Beginn: 01.07.2016



Marty Oelschläger
Doktorand T3
Tel. 1213
E-Mail: marty@mbi-berlin.de
Beginn: 01.06.2016



Marc Zieglarski
Techniker B4
Tel. 1314
E-Mail: zieglars@mbi-berlin.de
Beginn: 15.08.2016



In der Personalabteilung arbeitet seit 13. Juni 2015 unsere neue Kollegin, Frau Sevkan Saylik. Sie wird Frau Schulz während Mutterschutz und Elternzeit vertreten. Die Telefonnummer 1512 bleibt gleich.



Ab dem 25. August 2016 wird nur noch Frau Saylik vor Ort sein. Ihre Anliegen können Sie ihr auch gerne per E-Mail zusenden: saylik@mbi-berlin.de.

Frau Schulz wird voraussichtlich ab Ende nächsten Jahres wieder im Institut sein.

Wir wünschen Frau Saylik einen guten Start und Frau Schulz alles Gute.

Ausgeschiedene: (Stand 22.08.2016)

Dr. Diego Arbó	Gastwissenschaftler A3
Mursal Ali Abdo Baggash	Doktorand B2
Joel Bamberger	Azubi B1
Dr. Gopal Dixit	Gastwissenschaftler A1
Dr. Biswajit Guchhait	Wissenschaftler C1
Sebastian Friede	Doktorand C3
Robin Fröhlich	Praktikant C1
Peter Hawkins	Wissenschaftler A1
Stefan König	stud./wiss. Hilfskraft C2
Faruk Krecinic	Doktorand A2
Bruno Langbehn	Wissenschaftler A2
Dr. Jan Lüning	Wissenschaftler B
Pablo Nunez von Voigt	Wissenschaftler A2
Marko Perestjuk	stud.wiss. Hilfskraft C2
Thomas Rudert	EDV
Daniela Rupp	Wissenschaftler A2
Mario Sauppe	Wissenschaftler A2
Peter Susnjar	Praktikant A2
Maxim Sedov	Wissenschaftler B1
Josep Maria Serres	Wissenschaftler A3
Annabelle Spanier	Wissenschaftlerin A2
Tobias Sproll	Doktorand A1
Dr. Vadim Talalaev	Wissenschaftler C2
Tobias Tyborski	Doktorand C3
Anatoli Ulmer	Wissenschaftler A2
Björnsterne Zindler	Techniker A3

Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/ Master- & Diplomarbeiten

T. Tyborski

Ultrafast mid-infrared studies on BH_4^- ions, H_2PO_4^- ions and a bulk plasmon in Ga-doped ZnO

Dissertation (2016) Humboldt-Universität zu Berlin

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Dr. Olga Smirnova zur Professorin für Theoretische Physik an der Technischen Universität Berlin berufen

Die Technische Universität Berlin hat Dr. Olga Smirnova am 30. Juni 2016 zur Professorin für das Fachgebiet „Theoretische Physik mit dem Schwerpunkt Atomare und Molekulare Laserphysik“ berufen. Die S-Professur ist im Institut für Optik und Atomare Physik verankert. Die theoretische Physikerin Smirnova hat in 2000 ihren Doktorgrad von der Lomonosov Moscow State University erhalten. 2003 ging sie als Lise-Meitner Stipendiatin an die Technische Universität Wien und 2005 wechselte sie in die Theoriegruppe des Steacie Institute for Molecular Sciences (SIMS) in Kanada. Zum Max-Born-Institut kam Olga Smirnova 2009, um ihre eigene Theoriegruppe aufzubauen, 2010 erhielt sie den Karl-Scheel-Preis der Physikalischen Gesellschaft zu Berlin. Ihre Arbeit konzentriert sich auf die theoretische Beschreibung von Materie in intensiven Lichtfeldern zur Analyse und Kontrolle ultraschneller Dynamik in Atomen und Molekülen. An der TU Berlin wird Prof. Smirnova die Lehre insbesondere im Bereich ultraschneller Prozesse verstärken.

Wir freuen uns mit Prof. Dr. Smirnova über Ihre Berufung und gratulieren ihr ganz herzlich!

Novellierung des Wissenschaftszeitvertragsgesetz (WissZeitVG)

Das Wissenschaftszeitvertragsgesetz (WissZeitVG) wurde novelliert und ist am 17. März 2016 in Kraft getreten.

Die geänderten Vorschriften gelten für Verträge und Vertragsänderungen, die nach Inkrafttreten des Änderungsgesetzes vereinbart wurden. Bestehende Verträge sind nicht berührt.

Bei Neueinstellungen und Vertragsverlängerungen von Wissenschaftlern wird zusätzlich zum Vertrag ein „Vermerk zum Einstellungs-/Statusgespräch“ gefertigt. Hier werden die Forschungstätigkeiten und das daraus zu erzielende Qualifizierungsziel für den/die Wissenschaftler/in festgehalten. Die aufgeführten Ziele müssen nicht zwingend im festgelegten Zeitraum erreicht werden, dies kann auch erst danach geschehen. Auch ist der Anteil der Arbeitszeit für die Qualifizierung nicht entscheidend.

Beispiele für ein Qualifizierungsziel sind die Fertigstellung einer Dissertation oder das Erlernen von Techniken, die im Vermerk aufzuführen sind. Die Qualifizierungsdauer wird explizit festgehalten und richtet sich nach der Laufzeit des Arbeitsvertrags.

Kontakt: S. Saylik, Tel. 1512

Dr. Olga Smirnova installed as Professor at the Technical University Berlin



The Technical University Berlin has installed Dr. Olga Smirnova as a Professor for „Theoretical Physics with a Focus on Atomic and Molecular Laser Physics“ on 30 June 2016. The S-Professorship is anchored in the Institute for Optics and Atomic Physics on the TU.

The theoretical physicist Smirnova obtained her Ph.D. degree in 2000 at the Moscow State University. In 2003 she moved to the Technical University of Vienna as a Lise-Meitner fellow, in 2005 she joined the theory group at the Steacie Institute for Molecular Sciences, NRC Canada, becoming a permanent staff member in 2006. She came to the Max Born Institute in 2009 to

start her own theory group. In 2010 Smirnova was the recipient of the Karl-Scheel-Preis awarded by the Physikalische Gesellschaft zu Berlin. In her research, she focusses on using intense light fields to image and control attosecond dynamics in atoms and molecules. At the TU Berlin she will strengthen the curriculum in the fields of modern optics, intense light-matter interaction and ultrafast science.

We congratulate Prof. Dr. Smirnova to her new position as a professor at the TU Berlin!

Revision of the Act of Academic Fixed-Term Contract (Wissenschaftszeitvertragsgesetz (WissZeitVG))

On 17 March, 2016, the revised “Wissenschaftszeitgesetz (WissZeitVG)” came into force.

The revised rules apply to all new and modified employment contracts which are signed after the new act came into force. Existing older contracts shall not be affected.

In the case of contractual renewals and new recruitments of scientific staff a supplementary form “Vermerk zum Einstellungs-/Statusgespräch” (so-called “Notice of Recruitment and Status Talk”) will be added to the employment contract. In this form the planned research activities and the scientific qualification goals the scientist will have to achieve will be written down. It is not mandatory, that these qualification goals have to be achieved within the fixed time frame. As well, the proportion of the working time dedicated to the achievement of the qualification is not decisive.

Examples for qualification goals that could be listed in the form are the completion of a PhD thesis or the acquisition of skills and techniques. The duration of the qualification time will be explicitly recorded and refers to the duration of the employment contract.

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Preise / Prize

Verleihung des Lise-Meitner-Preises 2016 an Herrn Simon Birkholz



Simon Birkholz promovierte an der HU mit dem Prädikat summa cum laude und erhielt im Rahmen der Festveranstaltung am 13. Juli 2016 den Lise-Meitner-Preis 2016 für seine Dissertation über 'Monsterwellen'.

Wir gratulieren Simon Birkholz herzlich und wünschen ihm alles Gute für seine Zukunft!

* * *

Projekteinwerbungen

Bereich B

Projektbezeichnung: Heraeus-Stiftung Klausurtagung
27.-30.9.2016 Klausurtagung
Ultraschnelle Spektroskopie, Streuung und Abbildung mit
laser- und beschleunigergetriebenen Lichtquellen
Laufzeit: 01.04.2016 - 31.12.2016
Projektleiter: S. Eisebitt
Geldgeber: Heraeus-Stiftung

Projektbezeichnung: Amplitude Test Sequoia HD Prototype
Agreement Amplitude-MBI: Test Sequoia HD Prototype
Laufzeit: 01.04.2016 - 31.12.2016
Projektleiter: M. Kalashnikov
Geldgeber: Amplitude Technologies

Projektbezeichnung: PT-DESY 05K16BCB DynaMaX_2
Messplatz für Ultraschnelle Dynamik bei BESSY II.
Verbundprojekt mit FUB/Prof. Weinelt
Laufzeit: 01.07.2016 - 30.06.2019
Projektleiter: S. Eisebitt
Geldgeber: BMBF

Projektbezeichnung: PT DESY 05K16BC1 Split-X-MID_2
Split-and-Delay Instrument für European XFEL Beamline
Materials Imaging and Dynamics
Laufzeit: 01.07.2016 - 30.06.2019
Projektleiter: S. Eisebitt
Geldgeber: BMBF

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Betriebsrat

Krank im Urlaub – was tun?

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

es ist bedauerlich, kommt aber leider vor: Kaum ist die langersehnte Urlaubszeit angebrochen, der Stress lässt nach und dann ausgerechnet das! Ein Kratzen im Hals, man fühlt sich schlapp und die ersten untrüglichen Krankheitssymptome zeigen sich. So hat man sich die zur Erholung und Entspannung dringend benötigte Zeit nun wirklich nicht vorgestellt. Jetzt ist guter Rat gefragt: Wie soll man sich verhalten und ebenso wichtig, was passiert mit dem Urlaubsanspruch?

Zunächst sollte man ärztliche Hilfe suchen. Das kann sich bei einem Auslandsaufenthalt durchaus schwierig gestalten. Aus der ärztlichen Bescheinigung muss neben der (voraussichtlichen) Dauer der Erkrankung auch hervorgehen, dass diese Krankheit zur Arbeitsunfähigkeit führt. Die bloße Bescheinigung der Krankheit reicht nicht aus.

Danach ist der Arbeitgeber unverzüglich zu informieren. Im §5 des Entgeltfortzahlungsgesetzes (EntgFG) heißt es dazu: *„Dauert die Arbeitsunfähigkeit länger als drei Kalendertage, hat der Arbeitnehmer eine ärztliche Bescheinigung über das Bestehen der Arbeitsunfähigkeit sowie deren voraussichtliche Dauer spätestens an dem darauffolgenden Arbeitstag vorzulegen.“*

Um diese Frist einhalten zu können, ist es bei einem Auslandsaufenthalt angebracht, das Attest mittels E-Mail oder Fax zu übermitteln. Der Arbeitgeber muss nur solche Bescheinigungen anerkennen, die aus einem Land stammen, mit dem Deutschland ein Sozialversicherungsabkommen abgeschlossen hat und die entweder von einer staatlichen Krankenkasse bestätigt oder von einem zugelassenem Kassenarzt ausgestellt sind. Es ist deshalb wichtig, sich vor Reiseantritt zu informieren, ob ein solches Sozialversicherungsabkommen mit dem Reiseziel existiert. Der Abschluss einer privaten Zusatzversicherung kann sinnvoll sein.

Wenn die Arbeitsunfähigkeit korrekt angezeigt und belegt ist, hat das ganz normal die Entgeltfortzahlung im Krankheitsfalle zur Folge. Da krankheitsbedingt die Erfüllung des Urlaubsanspruches - rechtlich gesehen - unmöglich geworden ist, sind nach §9 Bundesurlaubsgesetz (BurlG) die „verlorenen“ Urlaubstage nachzugewähren. Doch Vorsicht: Das sollte man keinesfalls auf eigene Faust tun, indem man den Urlaub einfach verlängert. Vielmehr ist ein neuer Urlaubsantrag zu stellen, der vom Vorgesetzten zu genehmigen ist. Nach der Rückkehr sollte man sich vergewissern, ob die krankheitsbedingt nicht verbrauchten Urlaubstage dem Urlaubskonto gutgeschrieben wurden.

Erholsame Ferientage und, dass Sie gesund bleiben, wünscht Ihnen Ihr Betriebsrat.

Rechtlicher Hinweis: Alle Angaben beruhen auf bestem Wissen. Eine Gewähr für die Richtigkeit im rechtlichen Sinne kann jedoch nicht übernommen werden.

Works Council

What to do in case you get sick during your vacation?

Dear colleagues,

The long-awaited vacation has finally started and stress is slowly reducing. All of a sudden you are about to feel it - coming up with a scratchy throat! You feel weak and tired and the very first specific symptoms of sickness are triggered. It's particularly unfortunate, but it happens. You are getting sick during your vacation! That's not just how you wanted it to be. You neither expected nor imagined to spend your time for recharging your batteries ill and bed-ridden. Now it is time for good advice: What am I supposed to do next and what happens with my vacation entitlement?

First, of course, you should immediately look for medical care. During your stay abroad this can become unexpectedly difficult. Ask then for a medical certificate and pay attention that two things are confirmed: the (expected) duration of the illness and the inability to work. A note confirming the mere indication resp. diagnosis of the illness is not sufficient for sick pay leave. The next important step is to inform your employer. The Continuation of Remuneration Act, § 5, (Entgeltfortzahlungsgesetz EntgFG) stipulates the following: *“If the inability to work lasts for more than three calendar days (including Sundays and holidays), a medical certificate confirming the inability to work and its probable duration must be submitted to the Human Resources Department on the next working day“.*

In order to meet this deadline during your stay abroad the medical note should be sent via e-mail or fax. The employer has to recognize the medical certificate only when it comes from a country with which Germany has signed social security conventions, when it comes from an accredited doctor and when it is confirmed by a National Health Care Insurance. Therefore, it's important to check - prior to your departure - whether a social security with your holiday destination exists. You might be well advised in taking out an additional private health insurance.

If the medical certificate is accurately completed and forwarded, the continued remuneration in case of sickness will apply according to art.1 of the Federal Leave Act (BUrlG). Due to the proven inability to work you are entitled to take corresponding paid leave at a later date. However, you are required to give notice to your employer by submitting a new holiday application. By no means, should you extend your holiday on your own initiative. Furthermore, you should check your leave account balance for correctness.

Enjoy relaxing days and stay healthy!
Your Work's Council



Legal note: All details are provided according to the best of our knowledge; however, we do not accept any liability for the correctness in legal terms.

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Vereinbarkeit Beruf und Familie / Reconciliation of work and family life



Zertifikatsverleihung

Am 23. Juni 2016 war es so weit: Im Berliner Palais am Funkturm wurden rund 300 Arbeitgeber im Rahmen der 18. Zertifikatsverleihung zum audit berufundfamilie geehrt.

Manuela Schwesig, Bundesministerin für Familie, Senioren, Frauen und Jugend, und *Iris Gleicke*, Parlamentarische Staatssekretärin beim Bundesminister für Wirtschaft und Energie, überreichten den Vertretern von Unternehmen, Institutionen und Hochschulen das Zertifikat – den Beleg für ihr Engagement für eine familien- und lebensphasenbewusste Arbeitswelt und für familiengerechte Studienbedingungen.

Kontakt: M. Rink, Tel. 1551 & A. Grimm, Tel. 1500



Das audit steht unter der Schirmherrschaft von Bundesfamilienministerin *Manuela Schwesig* und Bundeswirtschaftsminister Sigmar Gabriel.



Auch das MBI gehörte dieses Jahr zu den Arbeitgebern, die dieses Zertifikat überreicht bekommen haben, vertreten durch *Margret Rink* und *Alexander Grimm*.

 **berufundfamilie**
arbeitgeberattraktivität.leben

#personalbewusst
www.berufundfamilie.de

Zertifikatsverleihung am 23.06.2016
Berliner Palais am Funkturm



„Ich bin vorbereitet“

Notfallmappe

Mit der Notfallmappe besteht die Möglichkeit, sich selbst und evtl. den Angehörigen einen umfassenden Überblick über die wichtigsten persönlichen Unterlagen zu verschaffen – für alle Fälle und insbesondere für den Fall, dass die Hilfe anderer in Anspruch genommen werden muss.

In der Notfallmappe können wichtige Dokumente übersichtlich zusammengestellt, sortiert, aufbewahrt und evtl. andere Aufbewahrungsorte vermerkt werden. So lässt sich Wichtiges kurzfristig finden. In einem Notfall fehlt meist die Zeit und die Ruhe zum Suchen!

Es ist möglich, individuelle Notizen auf Vordrucken zu vermerken und auch zu ergänzen, sowie anhand von Dokumentenchecklisten jede wichtige Unterlage sofort griffbereit zu haben.

Außerdem gibt die Notfallmappe wichtige Informationen und nützliche Hinweise, zum Beispiel zu den Themen Vorsorgevollmacht, Betreuungsverfügung, Patientenverfügung, Krankenhauseinweisung oder Trauerfall.

Die Notfallmappe liegt als PDF-Datei vor und kann am PC ausgefüllt, gespeichert und anschließend auf einem elektronischen Medium sicher verwahrt werden - z.B. auf CD gebrannt oder auf USB-Stick bei den Kindern, Eltern hinterlegt werden -. Bei Bedarf kann das Dokument selbstverständlich auch ausgedruckt werden.

Die Notfallmappe ist ein Angebot der berufundfamilie Service GmbH. Wir danken der berufundfamilie Service GmbH für ihr Einverständnis, die Notfallmappe über unseren Internet-Auftritt veröffentlichen zu dürfen. Die Notfallmappe ist nur in deutsch verfügbar und zu finden hier:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/Notfallmappe_Max_Born_Institut.pdf

Bei Fragen stehen Ihnen die Gleichstellungsbeauftragte und Vertreterin gerne zur Verfügung.

Kontakt: Margret Rink, Tel. 1551

The “Notfallmappe” (emergency case folder) is an efficient instrument providing yourself and possibly your relatives with a comprehensive overview of your most important personal documents for just in case emergency and in particular in situations you need the assistance of others.

In the “Notfallmappe” important documents can be gathered, sorted and kept in a clear and concise manner and even further repositories can be mentioned. In emergency situations you have no time and above all no calmness to search for these important documents. However, the “Notfallmappe” allows you to find them in a short time.

It is also possible to make individual notes on the given PDF forms or to complete them. On the basis of document checklists you will have all relevant data at your *finger tips*.

In addition the “Notfallmappe” provides important and useful information on various subjects such as “Vorsorgevollmacht” (an enduring power of attorney) “Betreuungsverfügung” (health care proxy), Patientenverfügung (patient decree), „Krankenhauseinweisung“ (hospitalisation) oder Trauerfall (bereavement).

The “Notfallmappe” is available as a PDF file and can be filled in directly on the PC, then saved onto any storage medium such as USB stick, CD and finally located and kept safely by children or parents. Of course, the „Notfallmappe“ can be printed, too.

We thank “berufundfamilie Service GmbH” for the authorization to publish the PDF file on our Intranet site of MBI. Sadly the file is only available in German and can be downloaded by clicking on

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/Notfallmappe_Max_Born_Institut.pdf

For any questions, the Equal Opportunities Officer and Representative are at your disposal.

Contact: Margret Rink, Tel. 1551



Ergebnisse aus den Workshops zum Thema „Arbeitszeit“

Im Rahmen eines von Margret Rink moderierten Workshops am 15. März 2016 wurde über verschiedene Gesichtspunkte zu den Themen „Arbeitszeit, Gleitzeit, Kernzeit, Urlaub und Urlaubsplanung, Heimarbeit und Servicezeiten“ diskutiert, und es wurden Ideen und Verbesserungsvorschläge der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter gesammelt. Am 8. April wurden diese Vorschläge dem Direktorium sowie Führungskräften mit Leitungsfunktionen in einem Meeting vorgestellt und über die Möglichkeiten und Grenzen ihrer Umsetzung diskutiert.

Als Ergebnis wurde ein Protokoll erstellt, das nun von den Direktoren verabschiedet wurde und auf der folgenden Intranetseite abrufbar ist:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/Ergebnisse%20Audit%20buf_Arbeitszeit_Unterschriften_FINAL.pdf

Das Protokoll umfasst sowohl positiv bewertete wie abgelehnte Anträge. Die Maßnahmen reichen von der Möglichkeit, zukünftig bis zu 32 Überstunden anstatt maximal 16 ins Folgejahr übertragen zu können, über die Urlaubsplanung, die regelmäßiger Bestandteil von Abteilungs- oder Gruppensitzungen sein sollte, bis hin zu Veranstaltungen wie dem wissenschaftlichen Kolloquium, die innerhalb der Kernzeit durchgeführt werden sollten.

Einige Punkte aus dem Themenbereich „Gleitzeit“ werden auch Veränderungen der Betriebsvereinbarung zur Arbeitszeit nach sich ziehen. Andere Beschlüsse, wie zum Thema „Servicezeiten“, werden in den nächsten Wochen noch näher mit den Betroffenen zu diskutieren sein.

Kontakt: Alexander Grimm, Tel. 1500

Audit family and work life balance – Results from the workshops on the topic „working time“

During a workshop on March, 15, moderated by Margret Rink, different aspects of the subjects “working time, flexible working hours, core time, holidays and holiday planning, homework and service hours” were discussed. Many ideas and suggestions for improvement were collected from the MBI personnel. On April 8, the proposals of the MBI members were presented to the directors and further personnel with leading functions, in order to discuss the options and limits of their implementation.

The results were recorded in a document that was now adopted by the directors and which can be found on the following intranet page:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/Ergebnisse%20Audit%20buf_Arbeitszeit_Unterschriften_FINAL.pdf

So far, the document is only available in German, but we are working on a translation that you will find on the same place in a few weeks. The document contains approved as well as rejected proposals. The measures range from the possibility to transfer a maximum of 32 hours of overtime to the following year (instead of 16), to the planning of holidays that should be a regular part of group meetings. Events and presentations like the scientific colloquium should be conducted within the core time.

Some agreements such as the “flexible working time” will result in changes of the employment agreement on working time (Betriebsvereinbarung zur Arbeitszeit). Other topics like the question of “service hours” will have to be further discussed with the concerned persons during the next weeks.

Contact: Alexander Grimm, Tel. 1500

Forschungsergebnisse

Extrem breite Infrarotspektren durch strukturelle Fluktuationen von Flüssigkeiten: Das hydratisierte Proton auf ultrakurzen Zeitskalen

Die Ursache der extrem breiten Infrarotabsorption von Protonen in wässriger Umgebung wird seit langem kontrovers diskutiert. Wissenschaftler des MBI und ein Forschungsteam der Ben Gurion Universität des Negev in Beer-Sheva, Israel, zeigten jetzt am Beispiel des Zundel-Kations ($\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2$) H_5O_2^+ , dass die umgebende Flüssigkeit fluktuierende elektrische Kräfte auf das Proton ausübt und damit seine Schwingungsbewegung zwischen den beiden Wassermolekülen moduliert. Dieser Mechanismus ruft zusammen mit niederfrequenten thermischen Bewegungen die extreme Verbreiterung des Infrarotspektrums hervor.

Das Proton (H^+), der positiv geladene Kern des Wasserstoffatoms, nimmt eine zentrale Rolle bei vielen Vorgängen in der Natur ein. In flüssigem Wasser wird der Transport von elektrischer Ladung durch die Bewegung von Überschuss-Protonen dominiert während die Bewegung von Protonen durch Zellmembranen die Grundlage der Zellatmung darstellt. Trotz dieser weitreichenden Relevanz sind die molekulare Natur und Dynamik von Überschuss-Protonen in Wechselwirkung mit Wassermolekülen ihrer Umgebung nicht vollständig verstanden. Schwingungs-, namentlich Infrarotspektroskopie hat dazu beigetragen, die molekularen Strukturen hydratisierter Überschuss-Protonen als Eigen- und Zundel-Kationen zu identifizieren. Diese Strukturen zeichnen sich durch eine überaus breite, unstrukturierte Infrarotabsorption aus, das sogenannte „Zundelkontinuum“ (Abb. 1). Sie sind in flüssigem Wasser instabil, d.h. wandeln sich auf der Femto- bis Pikosekunden Zeitskala (1 Pikosekunde = 1 ps = 10^{-12} s) in andere Strukturen um. Der dem Absorptionskontinuum zu Grunde liegende Mechanismus ist stark umstritten.

Wissenschaftlern des Max-Born-Institutes für Nichtlineare Optik und Ultrakurzzeitspektroskopie in Berlin und der Ben Gurion Universität des Negev in Beer-Sheva, Israel gelang es nun den Ursprung des Breitbandkontinuums durch nichtlineare Infrarotspektroskopie mit Femtosekunden-Zeitauflösung aufzuklären. Für das spezifische Modellsystem H_5O_2^+ , das aus zwei Wassermolekülen bestehende und von einem Proton zusammengehaltene Zundel-Kation ($\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2$), differenzierten sie in zeitaufgelösten Messungen das Zundelkontinuum von der OH Streck- und Biegeschwingungsdynamik der beiden Wassermoleküle (Abb. 2). Wie in *Angewandte Chemie Int. Ed.* (DOI: 10.1002/anie.201602523) berichtet, erlaubt eine gezielte Wahl der Femtosekunden-

Research Highlights

Fluctuating liquid structure induces ultrabroad infrared absorption: The hydrated proton on ultrafast time scales

The elusive infrared absorption continuum of protons in aqueous environment has been topic of intense controversial debate since half a century. A team of scientists from MBI and the Ben Gurion University of the Negev, Israel, show for the case of the Zundel cation ($\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2$) H_5O_2^+ that the surrounding liquid induces fluctuating electrical forces onto the proton, modulating its vibrational motions between the two water molecules. This mechanism, together with low-frequency thermal motions, results in the extreme broadening of the infrared spectrum.

The proton (H^+), the positively charged nucleus of a hydrogen atom, plays a fundamental role for many processes in nature. In liquid water, the transport of electrical charge is dominated by moving excess protons while proton motions across cell membranes are at the heart of cell respiration. In spite of this relevance, the molecular nature and dynamics of excess protons interacting with water molecules in their environment are not fully understood. Vibrational, in particular infrared spectroscopy has helped to identify limiting molecular structures of hydrated protons such as the Eigen and Zundel cations, where the latter displays an extremely broad unstructured infrared absorption, a so-called „Zundel continuum“ (Fig. 1). In liquid water, such structures are unstable and expected to undergo rapid changes on a time scale of femto- to picoseconds (1 picosecond = 1 ps = 10^{-12} s). The mechanisms underlying the absorption continua have remained highly controversial.

Researchers from the Max Born Institute for Nonlinear Optics and Short Pulse Spectroscopy in Berlin and the Ben Gurion University of the Negev in Beer-Sheva, Israel have now applied nonlinear infrared spectroscopy with femtosecond time resolution to elucidate the nature of the broadband continuum. For the particular model case H_5O_2^+ , the Zundel cation consisting of two water molecules held together by a proton ($\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2$), they dynamically dissect the Zundel continuum from the regular OH stretching and bending vibrations of the two water molecules (Fig. 2). As they report in *Angewandte Chemie Int. Ed.* (DOI: 10.1002/anie.201602523), a judicious choice of femtosecond vibrational excitation allows for isolating the transient continuum absorption. The different excitations show lifetimes below 60 fs, much shorter than the OH stretching and bending vibrations of neat water. A theoretical analysis of the results demonstrates that the extreme broadening of the infrared absorption is caused by motions of the inner proton exerted by the strong, rapidly

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Anregebedingungen von Molekülschwingungen die Isolation der kurzlebigen Kontinuumsabsorption. Die verschiedenen Schwingungsanregungen weisen hierbei Lebensdauern von unter 60 fs auf, weitaus kürzer als die der OH Streck- und Biegeschwingungen in reinem Wasser.

Die theoretische Analyse der Resultate zeigt, dass die extreme Verbreiterung der Infrarotabsorption aus Bewegungen des inneren Protons unter dem Einfluss starker, schnell fluktuierender elektrischer Felder der umliegenden polaren Lösungsmittelmoleküle resultiert. Die Energie der Protonbewegung entlang der sogenannten Protontransferkoordinate (in Richtung der Verbindung der zwei Wassermoleküle in $\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2$) wird durch die externen Felder stark moduliert, was gleichzeitig zu einer Energiemodulation der Schwingungsübergänge führt. So erkundet das System eine breite Verteilung von Übergangsenergien auf einer Zeitskala von weniger als 100 fs. Zusammen mit Schwingungsobertönen, Kombinationstönen und Schwingungen, welche den Abstand zweier Wassermoleküle verändern, führen die durch das Feld modulierten Übergänge zu der beobachteten extremen Verbreiterung der Infrarotabsorption. Aufgrund der extrem schnellen strukturellen Fluktuationen werden bestimmte H^+ Anordnungen sehr schnell verwaschen, d.h. das System weist eine extrem kurzlebige strukturelle Erinnerung auf.

Dieser neue Blick auf das Zundel-Kation geht deutlich über die vielen, in der Gasphase durchgeführten Studien an hydratisierten Protonen hinaus, in welchen aufgrund der Tieftemperaturbedingungen das Zundelkontinuum nicht beobachtet wird. Die Resultate sind für viele dynamische Aspekte hydratisierter Protonen von Bedeutung, sei es für den Protontransport in Wasser durch den berühmten von Grotthuss-Mechanismus, in Wasserstoff-Brennstoffzellen oder biologischen Systemen, deren Funktion durch die Translokation von Protonen bestimmt ist.

fluctuating electrical fields that originate from the surrounding polar solvent molecules. The energy of proton motions along the so-called proton transfer coordinate, the direction connecting the two water molecules in $(\text{H}_2\text{O}\dots\text{H}^+\dots\text{OH}_2)$, is strongly modulated by these external fields, resulting in a concomitant modulation of vibrational transition energies. On a time scale faster than 100 fs, the system explores a broad range of transition energies. Together with vibrational overtones, combination tones and modes changing the distance between the two water molecules the field modulated transitions lead to the observed extreme broadening of the infrared absorption. Due to the extremely fast structural fluctuations, particular H^+ arrangements are washed out very rapidly, i.e., the system has an extremely short-lived structural memory.

This new view at the Zundel cation clearly goes beyond the many studies of gas phase cluster work on hydrated protons, where due to the low temperature conditions, the Zundel continuum is not observed. The results are of relevance for many dynamic aspects of hydrated protons, be it for proton transport in water by the infamous von Grotthuss mechanism, in hydrogen fuel cells, or biological systems functioning with proton translocation mechanisms.

Originalpublikation: Angewandte Chemie International Edition, 10.1002/anie.201602523

„The Hydrated Excess Proton in the Zundel Cation H_5O_2^+ : The Role of Ultrafast Solvent Fluctuations“

Fabian Dahms, Rene Costard, Ehud Pines, Benjamin P. Fingerhut, Erik T. J. Nibbering, Thomas Elsässer

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.201602523/abstract>

Kontakt: E. T. J. Nibbering Tel. 1477, T. Elsässer Tel. 1400

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

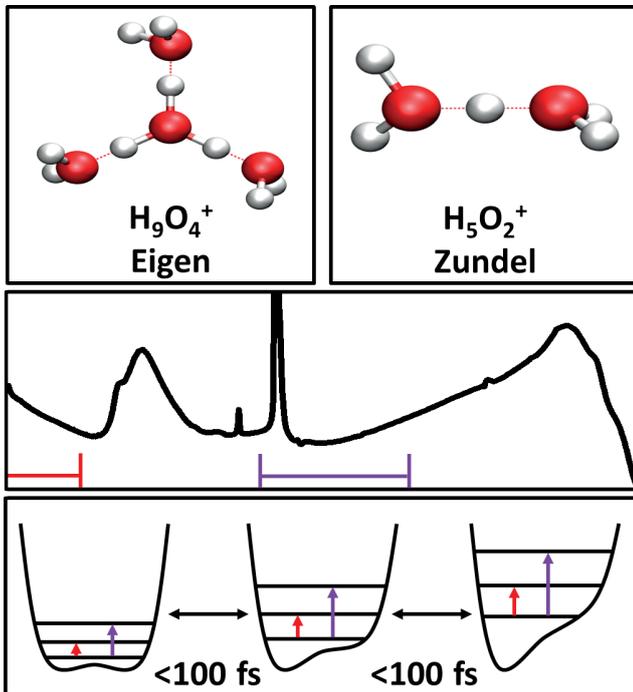


Abb. 1: Die Hydratisierung von Protonen geht weit über das typische Textbuchbeispiel des Hydroniums (H_3O^+) hinaus. Eigen- und Zundel-Kationen wurden nach den führenden Wissenschaftlern Manfred Eigen und Georg Zundel benannt, welche diese Strukturen in den sechziger Jahren des 20. Jahrhunderts postuliert haben. Das lineare Absorptionsspektrum im mittleren Infrarotbereich zeigt die deutlichen Beiträge von OH Streck- und Biegeschwingungen der Wassermoleküle und das spektral sehr breite Zundelkontinuum. Dieses Zundelkontinuum resultiert aus den ultraschnellen Potentialfluktuationen der Protontransferkoordinate, was die Modulation der Übergangsenergien von Fundamentalschwingung, Obertonschwingungen und Kombinationschwingungen zur Folge hat.

Fig. 1: Hydration of protons goes beyond the hydronium (H_3O^+) species typically mentioned in chemistry textbooks. Eigen and Zundel cations have been named after two leading German scientists Manfred Eigen and Georg Zundel who proposed these structures in the 1960s. The mid-infrared spectrum of the Zundel cation shows the marked contributions of OH stretching and bending vibrations, and the significant broadband Zundel continuum. This Zundel continuum is caused by the ultrafast fluctuating potential of the proton transfer coordinate that modulates fundamental, overtone and combination tone transitions.

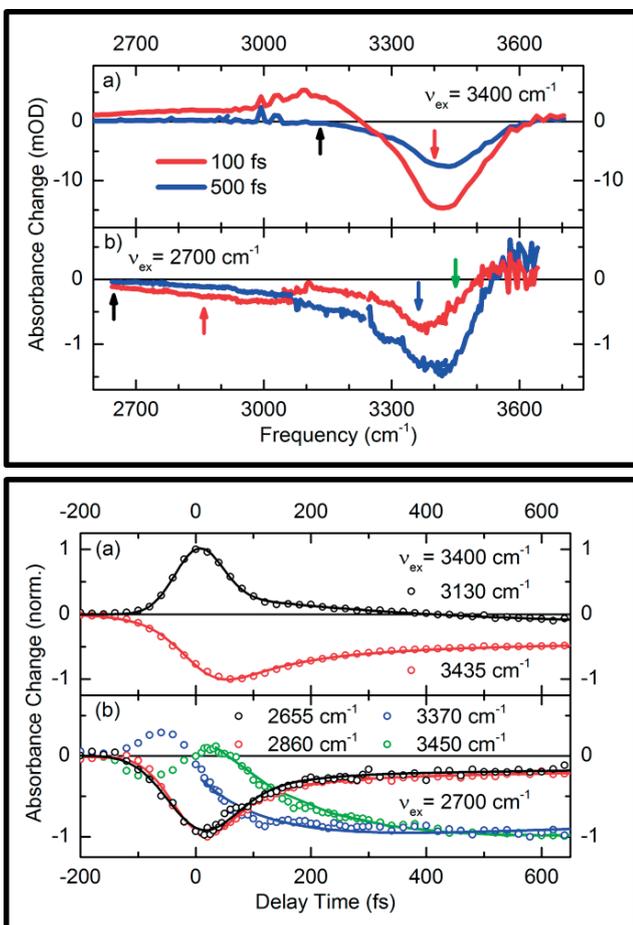


Abb. 2: Transiente Infrarotspektren zeigen die unterschiedliche Antwort der OH- Streckschwingung und des Zundelkontinuums nach Femtosekundenanregung.

Fig. 2: Transient IR spectra showing the distinct response of the OH stretching mode and the Zundel continuum after femtosecond excitation

Forschungsergebnisse

Spinpolarisation durch Starkfeldionisation

Starkfeldionisation wird seit mehr als einem halben Jahrhundert untersucht. Dennoch ist die Rolle des Elektronenspins während dieses Prozesses weitgehend übersehen worden. Unsere gemeinsame experimentelle und theoretische Untersuchung erbrachte nun das erstaunliche Ergebnis, dass die Chance ein Spin-up oder ein Spin-down Elektron aus einem Atom herauszulösen sehr unterschiedlich sein kann.

Als eine Grundeigenschaft des Elektrons spielt der Spin eine entscheidende Rolle in der elektronischen Struktur der Materie, von Molekülen und Atomen bis zu Feststoffen, wobei er beispielsweise die magnetischen Materialeigenschaften bestimmt. Ultrakurze Elektronenpulse sind einzigartige Werkzeuge um Materialien zu untersuchen, sowohl deren Struktur als auch Dynamik, und eröffnen ein reiches Feld der ultraschnellen Bildgebung mittels Beugung. Da der Elektronenspin eine wesentliche Variable bei der Beugung darstellt, würden ultrakurze Pulse spinpolarisierter Elektronen diesem Feld eine völlig neue Dimension hinzufügen. Aber wo könnte man solche Pulse erhalten?

Eine Möglichkeit ist die Ionisation in starken Laserfeldern zu nutzen. Dieser Prozess erzeugt von Natur aus Elektronen in ultrakurzen Stößen. Die Bursts dauern nur einen kleinen Bruchteil der Laserperiode an, wenn sie von den Grenzen des Bindungspotentials freigesetzt werden. Aber wären diese Elektronenbursts spinpolarisiert? Überraschenderweise ist diese Frage bis vor kurzem nie gestellt worden.

Diese Situation hat sich nun mit der gemeinsamen experimentellen und theoretischen Arbeit von Alexander Hartung et al., inspiriert von der früheren theoretischen Vorhersage von I. Barth und O. Smirnova (Phys. Rev. A 88, 013401, 2013), geändert. Gas von Xe-Atomen nutzend, präsentieren die Autoren den ersten experimentellen Nachweis von Elektronenspinpolarisation erzeugt durch Starkfeldionisation. Die gemessene Spinpolarisation, siehe Abb.1, erreichte Werte bis zu 30% hoch, wobei sich ihr Vorzeichen mit der Elektronenenergie umkehrt. Diese Arbeit eröffnet die neue Dimension des Spins in der Starkfeldphysik. Sie ebnet den Weg für die Erzeugung von Sub-Femtosekunden, spinpolarisierten Elektronenpulsen mit zahlreichen Anwendungen, die sich von der Untersuchung magnetischer Eigenschaften von Materie auf ultraschnellen Zeitskalen bis hin zum Testen chiraler molekularer Systeme mit Sub-Femtosekunden Zeit- und Sub-Ångström Raumauflösung erstrecken. Die Veröffentlichung zeigt auch, dass Spinpolarisation während der Laser-getriebenen Elektronenrekollision mit dem Mutter-Ion wichtig ist, wenn solch eine Rekollision durch ein elliptisches Laserfeld herbeigeführt wird. Da bei der Laser-getriebenen Elektronenkollision mit dem Mutter-Ion das Elektron vollständig durch das Laserfeld gesteuert wird, kann

Research Highlights

Spin polarization by strong field ionization.

Strong field ionization has been studied for over half a century. Yet, the role of electron spin during this process has been largely overlooked. Surprisingly, our joint experimental and theoretical study shows that a chance of detaching spin-up or spin-down electron from an atom can be very different.

As a fundamental property of the electron, the spin plays a decisive role in the electronic structure of matter, from molecules and atoms to solids, where it determines, for example, the magnetic properties of matter. Ultrashort pulses of electrons are unique tools for studying materials, both their structure and dynamics, opening a rich field of ultrafast diffraction imaging. Since electron spin is an essential variable in diffraction, ultrashort pulses of spin-polarized electrons would add a completely new dimension to this field. But where could one get such pulses?

One way is to use ionization in strong laser fields. This process naturally produces electrons in ultrashort bursts. The bursts last only a small fraction of the laser cycle when they are released from the confines of the binding potential. But would these electron bursts be spin-polarized? Surprisingly, until very recently, this question has never been asked.

This situation has now changed with the joint experimental and theoretical work of Alexander Hartung et al, inspired by the earlier theoretical prediction of I. Barth and O. Smirnova (Phys. Rev. A 88, 013401, 2013). Using the gas of Xe atoms, the authors present the first experimental detection of electron spin polarization created by strong-field ionization. The measured spin-polarization, shown in Fig.1, was found to be as high as 30%, changing its sign with the electron energy. This work opens the new dimension of spin to strong-field physics. It paves the way to the production of sub-femtosecond spin-polarized electron pulses with applications ranging from probing the magnetic properties of matter at ultrafast timescales to testing chiral molecular systems with sub-femtosecond temporal and sub-ångström spatial resolutions. The paper also shows that spin polarization is important during laser-driven electron recollision with the parent ion, when such recollision is induced by the elliptical laser field. Since in the laser-driven electron collision with the parent ion the electron is fully controlled by the laser field, the dynamics can now be studied not only with attosecond temporal and angstrom spatial resolution, but also with spin sensitivity. This would allow chiral molecules to be probed with sub-femtosecond temporal resolution and sub-ångström spatial resolution. Finally, spin polarization of the ejected electron is firmly linked to the creation of the parent ion in an initially spin-polarized state. Spin-orbit coupling then leads to internal circular electron and spin currents.

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

die Dynamik nun nicht nur mit Attosekunden zeitlicher und Ångström räumlicher Auflösung untersucht werden, sondern auch mit Spin-Empfindlichkeit. Dies würde es ermöglichen chirale Moleküle mit Sub-Femtosekunden Zeitauflösung und Sub-Ångström Raumauflösung zu untersuchen. Abschließend, die Spinpolarisation des herausgelösten Elektrons ist fest verbunden mit der Erzeugung des Mutter-Ions in einem anfänglich spinpolarisierten Zustand. Spin-Bahn-Kopplung führt dann zu internen ringförmigen Elektronen- und Spinströmen.

Original publication: Nature Photonics Letter, Vol 10, 526–528 (2016)

doi:10.1038/nphoton.2016.109

„Electron spin polarization in strong-field ionization of xenon atoms“

Alexander Hartung, Felipe Morales, Maksim Kunitski, Kevin Henrichs, Alina Laucke, Martin Richter, Till Jahnke, Anton Kalinin, Markus Schöffler, Lothar Ph. H. Schmidt, Misha Ivanov, Olga Smirnova & Reinhard Dörner

<http://www.nature.com/nphoton/journal/v10/n8/abs/nphoton.2016.109.html>

Contact: Olga Smirnova, Tel. 1340, Misha Ivanov, Tel. 1210
Felipe Morales, Tel. 1358

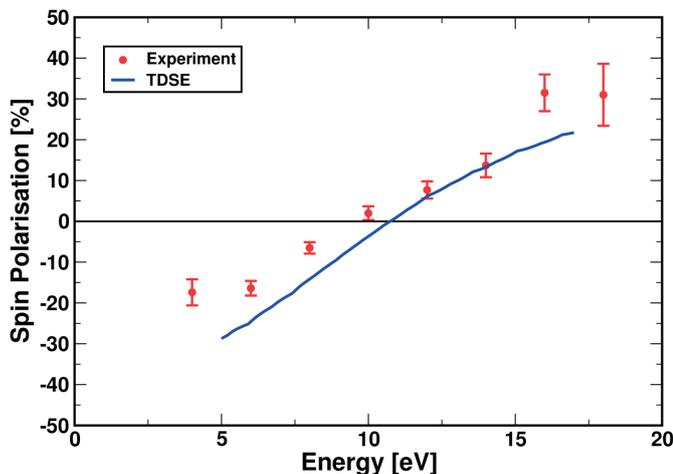


Abb.: Spinpolarisation gemessen als Funktion der Elektronenenergie. Die blaue Kurve ist eine theoretische Vorhersage, während die roten Punkte mit Fehlerbalken die experimentellen Ergebnisse zeigen. Die Messung erfolgte für Xe-Atome.

Fig: Spin polarization measured as a function of electron energy. The blue curve is a theoretical prediction, while the red dots with error-bars show experimental results. The measurement was done for Xe atom.

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Forschungsergebnisse

Ultrastark, ultraschnell und lokal: Wasser induziert elektrische Felder an der DNA-Oberfläche

Struktur und Dynamik der DNA-Doppelhelix werden entscheidend durch die umgebende Wasserhülle beeinflusst. Neue Ultrakurzzeit-Experimente zeigen, dass die beiden ersten Wasserschichten extrem starke elektrische Felder von bis zu 100 Megavolt/cm erzeugen, die auf der Femtosekunden-Zeitskala fluktuieren und auf eine Reichweite von etwa 1 nm begrenzt sind.

Als Träger der Erbinformation weisen DNA-Moleküle in ihrer natürlichen wässrigen Umgebung eine Doppelhelixstruktur auf, die aus zwei gegenläufigen gewundenen Strängen von Nucleotiden aufgebaut ist (Abb. 1A). Eine alternierende Anordnung negativ geladener Phosphatgruppen und polarer Zuckereinheiten bildet das Rückgrat der Doppelhelix, welches direkt mit den umgebenden Wassermolekülen wechselwirkt. Die insgesamt negative Ladung der Doppelhelix wird durch positiv geladene Gegenionen, z.B. Natriumionen kompensiert, die sich in wässriger Umgebung dicht an der Helixoberfläche befinden. Die Wechselwirkung von elektrischen Dipolmomenten der Wassermoleküle mit den Ladungen der Gegenionen und Phosphatgruppen sowie mit den polaren Einheiten erzeugt elektrische Felder an der DNA-Oberfläche, deren Eigenschaften trotz intensiver Forschung bis heute kontrovers diskutiert werden. Dies liegt wesentlich an der strukturellen Komplexität dieses Vielteilchensystems und seinen thermischen Fluktuationen auf kurzen Zeitskalen.

Wissenschaftlern des Max-Born-Instituts in Berlin ist es jetzt erstmals gelungen, Stärke, Reichweite und ultraschnelle Dynamik der an einer nativen DNA-Oberfläche auftretenden elektrischen Felder quantitativ zu bestimmen. Wie sie in der Zeitschrift „Journal of Physical Chemistry Letters“ berichten, dienen Schwingungen im Rückgrat der Doppelhelixstruktur von natürlicher Salmon DNA als Sonden um die elektrischen Wechselwirkungen räumlich und zeitlich abzubilden. Die elektrischen Felder an der DNA-Oberfläche beeinflussen hierbei direkt die Form und Dynamik der Schwingungsresonanzen, welche mit einem speziellen Verfahren, der sog. zweidimensionalen Infrarotspektroskopie, in Echtzeit auf einer Zeitskala im Femtosekundenbereich ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) aufgezeichnet werden (Abb. 1B). Um unterschiedliche Beiträge zu den fluktuierenden elektrischen Feldern an der DNA-Oberfläche zu unterscheiden, wurde der Wassergehalt der DNA-Proben systematisch variiert.

Die Experimente und umfangreiche theoretische Analysen zeigen, dass Wassermoleküle in den ersten beiden Schichten, die die DNA umgeben, ein extrem starkes elektrisches Feld erzeugen, während ionische Gruppen und weiter außen

Highlights

Ultrastrong, ultrafast and local: water induces electric fields at the surface of DNA

The structure and dynamics of the DNA double helix are influenced in a decisive way by the surrounding water shell. New experiments in the ultrafast time domain show that the first two water layers at the DNA surface generate electric fields of up to 100 megavolts/cm which fluctuate on the femtosecond time scale and are limited to a spatial range on the order of 1 nm.

DNA molecules are the carrier of genetic information and form a double helix structure in their native aqueous environment. This structure consists of two opposite twisted strands of nucleotides (Fig. 1A). An alternating arrangement of negatively charged phosphate groups and polar sugar units forms the backbone of the double helix structure which interacts directly with the surrounding water molecules. The overall negative charge of the double helix is compensated for by positively charged counterions such as sodium ions which in an aqueous environment are located in direct proximity to the DNA surface. The interaction of the electric dipoles of water molecules with the charges of the counterions and phosphate groups as well as the polar units generates electric fields at the DNA surface. Such fields are being discussed in a highly controversial way, even after decades of intense research, reflecting the structural complexity of this many-body system and its thermal fluctuations on short time scales.

Scientists from the Max-Born-Institute in Berlin have now succeeded for the first time in determining the strength, range, and ultrafast dynamics of electric fields at a native DNA surface. In a recent paper published in the Journal of Physical Chemistry Letters, they report how vibrations of the backbone of native salmon DNA serve as probes for mapping electric interactions in space and time. Electric fields at the surface directly influence the shape and dynamics of vibrational resonances which are recorded in real-time on the femtosecond time scale ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) by a method referred to as two-dimensional infrared spectroscopy (Fig. 1B). The water content of the DNA samples has been varied in a systematic way to discern different contributions to the fluctuating electric fields at the DNA surface.

The experiments and a detailed theoretical analysis performed in parallel show that water molecules in the first two layers at the DNA surface generate an extremely strong electric field whereas the ionic groups and outer water layers play a minor role. The spatial range of the field is approximately 1 nm, its strength reaches values up to 100 megavolts/cm (hundred million volts per centimeter) as shown in Fig. 1C. Thermal motions of the water molecules result in field fluctuations of 25

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

liegende Wassermoleküle nur eine untergeordnete Rolle spielen. Die räumliche Reichweite des Feldes beträgt nur etwa 1 nm, bei einer Stärke von bis zu 100 MV/cm (100 Millionen Volt pro Zentimeter) wie in Abb. 1C dargestellt. Thermische Bewegungen der Wassermoleküle führen zu Feldfluktuationen von 25 MV/cm auf einer Zeitskala von 300 fs. Die Zeitskala der Fluktuationen zeigt, dass die Bewegung der Wassermoleküle durch die Kopplung an die strukturierte DNA-Oberfläche behindert und im Vergleich zu reinem Wasser verlangsamt wird. Diese neuen, erstmals quantitativen Befunde sind wichtig für das Verständnis der maßgeblichen Rolle von Wasser und seiner Dynamik an biologischen Grenzflächen, etwa geladenen Zellmembranen und Oberflächen von Proteinen.

Kontakt: T. Siebert, Tel. 1414, B. Fingerhut, Tel. 1404, T. Elsässer, Tel. 1400

MV/cm on a 300 fs time scale. The time scale of fluctuations demonstrates a hindrance of water motions due to the coupling to the corrugated DNA surface and a slowing down compared to neat water. This new quantitative insight is important for understanding the key role of water and its dynamics at biological interfaces such as charged cell membranes and the surface of proteins.

Originalpublikation: The Journal of Physical Chemistry Letters, 2016, 7 (16), pp 3131–3136, DOI: 10.1021/acs.jpcclett.6b01369
Range Magnitude and Ultrafast Dynamics of Electric Fields at the Hydrated DNA Surfaces
T. Siebert, B. Guchhait, Y. Liu, B. P. Fingerhut, T. Elsaesser

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcclett.6b01369>

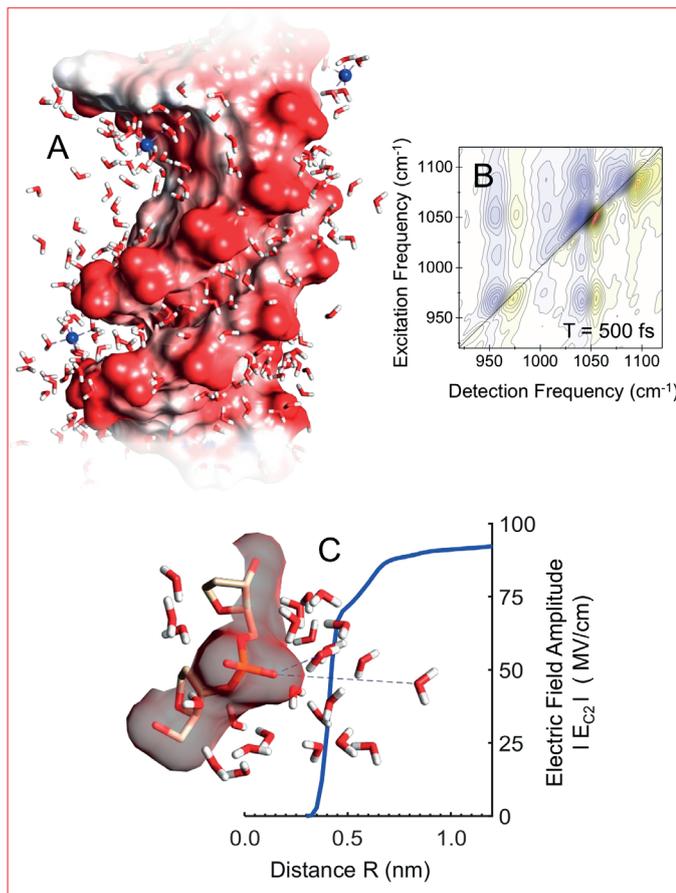


Abb. 1: (A) Oberfläche einer DNA-Doppelhelix. Der Verlauf der Helixstränge ist an den Sauerstoffatomen der Phosphatgruppen (rot) zu erkennen. In blau sind Gegenionen gezeigt, die kleinen gewinkelten Strukturen sind Wassermoleküle. (B) Zweidimensionales Infrarotspektrum der Schwingungen des DNA-Rückgrats. Als Funktion der Anrege- und der Detektionsfrequenz sind nichtlineare Schwingungssignale gezeigt. Die Linienform der Resonanzen auf der Diagonalen (gleiche Anrege- und Detektionsfrequenz) wird direkt durch fluktuierende elektrische Felder beeinflusst, die Signale außerhalb der Diagonale werden durch Kopplungen zwischen den Schwingungen verursacht. (C) Verlauf des zeitlich gemittelten elektrischen Feldes (blau) als Funktion des Abstandes von der DNA-Oberfläche. Wassermoleküle in der ersten Schicht (um 0.4 nm) erzeugen ca. 70% des Gesamtfeldes, die zweite Wasserschicht trägt ca. 20% bei.

Fig. 1: (A) Surface of a DNA double helix. The twisted strands of the helix are represented by oxygen atoms (red) of the phosphate groups. Counterions are shown in blue, the small angled structures are water molecules. (B) Two-dimensional infrared spectrum of the DNA backbone. Nonlinear vibrational signals are plotted as a function of excitation and detection frequency. The lineshapes of the resonances on the diagonal (identical excitation and detection frequency) are directly influenced by fluctuating electric fields. The off-diagonal signals originate from couplings between different backbone vibrations. (C) Time-averaged electric field (blue) as a function of the distance from the DNA surface. Water molecules in the first layer (around 0.4 nm) generate approximately 70% of the total field, the second water layer contributes some 20%

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Forschungsergebnisse

Ein neuer Twist in der Femtochemie durch Attosekundenforschung

Die Attosekundenforschung ist ein spannendes neues Forschungsgebiet der modernen Physik, mit dem Ziel die Bewegung von Elektronen in Atomen, Molekülen und Festkörpern zeitaufgelöst zu vermessen. Elektronendynamik entsteht durch kohärente Anregung verschiedener elektronischer Zustände und kann mit Zeitskalen im Bereich von Attosekunden extrem schnell sein. Chemie hingegen ist das Aufbrechen und die Neuf ormation von elektronischen Bindungen, bedingt durch die räumliche Umlagerung von atomaren oder molekularen Reaktionspartnern. Solche chemische Dynamik spielt sich auf der langsameren Femtosekundenzeitbasis ab und wird schon länger zeitaufgelöst untersucht, seit den Pionierleistungen des kürzlich verstorbenen Nobelpreisträgers Ahmet Zewail.

Nichtsdestotrotz gibt es spannende Wege, auf denen die zeitaufgelöste Erforschung chemischer Reaktionen stark von den technologischen Entwicklungen in der Attosekundenphysik profitieren kann. Ein solcher Weg wurde in der kürzlich veröffentlichten Arbeit von Drescher et al. beschritten. Attosekundenpulse werden durch Hohe Harmonische Erzeugung generiert, durch die Photonen aus dem infraroten Spektralbereich in einer stark nicht-linearen Wechselwirkung mit Materie in den Frequenzbereich des extremen Ultravioletts (XUV) konvertiert werden. Die kurze zeitliche Dauer solcher Attosekundenpulse bedingt ein breites, kontinuierliches Frequenzspektrum, ideal geeignet für Absorptionsexperimente. Die erreichten Photonenenergien decken den Energiebereich bis zu hunderten von Elektronenvolt ab, mit denen Elektronen in den kernnahen Schalen von Atomen angeregt werden können.

Übergänge von gebundenen Elektronen aus kernnahen Schalen in die Valenzschale bieten einzigartige Einblicke in die Struktur und Dynamik von Molekülen. Aufgrund der starken Lokalisierung der Kernschalen sind diese Übergänge elementspezifisch. Gleichzeitig ist in ihnen aber auch die intramolekulare Umgebung des jeweiligen Atoms kodiert, da das Elektron in eine Vakanz in der Valenzschale gehoben wird, die von den chemischen Bindungen des Atoms im Molekül abhängt (siehe Abb. 1). Wichtig ist nun, dass solche Kern-Valenzschalenübergänge nur sehr kurze Lebensdauern im Bereich weniger Femtosekunden haben. Die Anwendung ultrakurzer XUV-Pulse bietet daher neue Ansätze für zeitaufgelöste chemische Studien: Chemische Dynamik, etwa mit einem ultravioletten (UV) Laserpuls angestoßen, kann aus der Perspektive verschiedener Atome innerhalb eines Moleküls in einem transienten XUV-Absorptionsexperiment

Highlights

Attosecond Science opens new Avenues in Femtochemistry

Attosecond Science is a new exciting frontier in contemporary physics, aimed at time-resolving the motion of electrons in atoms, molecules and solids on their natural timescale. Electronic dynamics derives from the creation and evolution of coherence between different electronic states and proceeds on sub-femtosecond timescales. In contrast, chemical dynamics involves position changes of atomic centers and functional groups and typically proceeds on a slower, femtosecond timescale inherent to nuclear motion.

Nonetheless, there are exciting ways in which chemistry can hugely benefit from the technological developments pushed forward in the vibrant field of Attosecond Science. This was exploited in the work recently published by Lorenz Drescher and coworkers. Attosecond pulses are generated in the process of High Harmonic Generation (HHG), in which infrared photons are upconverted to the extreme ultraviolet (XUV) frequency domain in a highly non-linear interaction of intense coherent light and matter. The short duration of attosecond pulses implies a frequency spectrum with photon energies spanning from a few electron volts (eV) to hundreds of eV. Such broad and continuous frequency spectra are ideally suited for core shell absorption measurements in molecules.

Core shell to valence shell transitions are a unique probe of molecular structure and dynamics. Core-to-valence transitions are element specific, due to the highly localized nature of core orbitals on specific atoms. On the other hand the intramolecular local environment of specific atomic sites is encoded, since an electron is lifted from a core orbital to a hole in the valence shell, affected by chemical bonding (see Fig. 1). Importantly, these transitions typically correspond to very short lifetimes of only a few femtoseconds. The use of ultrashort XUV pulses hence gives a new twist to the ultrafast studies of chemistry: It allows to probe chemical dynamics, initiated by a UV pump laser pulse, from the perspective of different reporter atoms within a molecule in an XUV transient absorption experiment. This is now beginning to be explored by a number of groups around the world.

In the experiment carried out by Drescher and coworkers at the MBI, photodissociation of iodomethane (CH_3I) and iodobenzene ($\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$) was studied with time-resolved XUV transient absorption spectroscopy at the iodine pre- $\text{N}_{4,5}$ edge, using femtosecond UV pump pulses and XUV probe pulses from HHG (see Fig.2). For both molecules the molecular core-to-valence absorption lines were found to fade immediately,

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

untersucht werden. Diese neue Art von chemischen Studien werden im Moment von einigen wenigen Arbeitsgruppen auf der Welt erprobt.

In dem von Drescher et al. am MBI ausgeführten Experiment wurde die Photodissoziation von Iodmethan (CH_3I) und Iodbenzol ($\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$) mittels transientser XUV-Absorptionsspektroskopie untersucht (siehe Abb. 2). Diese beiden Moleküle unterscheiden sich durch den Bindungspartner des Iodatoms; in einem Falle ist dies eine Methylgruppe (CH_3), im anderen Falle eine Phenylgruppe mit dem charakteristischen Kohlenstoffring (C_6H_5). Absorption eines UV-Femtosekundenpulses führt zum Brechen der Bindung zwischen dem Iod- und dem benachbarten Kohlenstoffatom und damit zur Erzeugung von atomarem Iod. Untersucht wurde dies durch Absorption an der $\text{N}_{4,5}$ -Kante des Iodatoms. In beiden Molekülen verschwinden die molekularen Kern-Valenzschalenübergänge bei UV-Absorption innerhalb der experimentellen Zeitaufösung. Die zum atomaren Iod hin konvergierenden Übergänge erscheinen unverzüglich im Falle von CH_3I , jedoch zeitverzögert im Falle von $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$. Im Falle von CH_3I wurde diese Beobachtung als die UV-Erzeugung einer Vakanz in der Valenzschale interpretiert, die in der Nähe des Iodatoms lokalisiert ist. Damit ergibt sich eine hohe Wahrscheinlichkeit für einen XUV-Übergang aus dem Kernzustand des Iodatoms. Das Experiment zeigt, wie die Valenzschale während der Dissoziation des Moleküls relaxiert. Dabei wird eine kontinuierliche Verschiebung der Übergangsenergie der zum atomaren Iod hin konvergierenden Übergänge gemessen. In Falle von $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$ hingegen weist das zeitverzögerte Erscheinen der Absorptionsübergänge auf eine UV-erzeugte Vakanz hin, die ursprünglich innerhalb des Moleküls räumlich entfernt vom Iod-Reporteratom lokalisiert ist. Damit ist die Wahrscheinlichkeit für einen Kern-Valenzschalenübergang gering. Die Vakanz muss zuerst durch das Molekül wandern, bevor sie beobachtet werden kann. Dieses Verhalten ist der dominanten $\pi \rightarrow \sigma^*$ UV-Anregung in Iodbenzol zuzuschreiben, eine Folge des charakteristischen delokalisierten Elektronensystems im Kohlenstoffring.

Während in der gerade veröffentlichten Arbeit die experimentellen Daten mittels eines einfachen Modells erklärt wurden, ermöglicht das MBI mit seiner neu gegründeten Abteilung für Theorie einzigartige Möglichkeiten für gemeinsame experimentelle und theoretische Untersuchungen von transienter XUV-Absorptionsspektroskopie photochemischer Prozesse. Dabei wird auch eine neue theoretische Herangehensweise zum Einsatz kommen, die jüngst von ForscherInnen des MBI in Kollaboration mit KollegInnen in Kanada, dem Vereinten Königreich und der Schweiz entwickelt wurde.

within the pump-probe time-resolution. Absorption lines converging to the atomic iodine product however emerge promptly in CH_3I but are time-delayed in $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$. In CH_3I , we interpret this observation as the creation of an instantaneous new target state for XUV absorption by the UV pump pulse, which is then subject to relaxation of the excited valence shell as the molecule dissociates. This relaxation shows in a continuous shift in energy of the emerging atomic absorption lines in CH_3I , which we measured in the experiment. In contrast, the delayed appearance of the absorption lines in $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$ is indicative of a UV created vacancy, which within the molecule is initially spatially distant from the iodine reporter atom and has to first travel intramolecular before being observed. This behaviour is attributed to the dominant $\pi \rightarrow \sigma^*$ UV excitation in iodobenzene, which involves the π orbital of the phenyl moiety.

While in the current work only a simplistic independent particle model was used to rationalize the observed experimental findings, MBI with its newly created theory department provides unique opportunities for joint experimental and theory studies on XUV transient absorption of photochemical processes. This will involve a new theoretical approach developed recently by researchers from MBI together with colleagues in Canada, the UK and Switzerland, which was recently submitted as a publication.

Original publication:

Journal of Chemical Physics Communication **145**, 011101 (2016),
doi: 10.1063/1.4955212
„XUV transient absorption spectroscopy of iodomethane and iodobenzene photodissociation“
L. Drescher, M.C.E. Galbraith, G. Reitsma, J. Dura, N. Zhavoronov, S. Patchkovskii, M.J.J. Vrakking, and J. Mikosch

<http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jcp/145/1/10.1063/1.4955212>

Contact: Dr. Jochen Mikosch, Tel. 1240

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

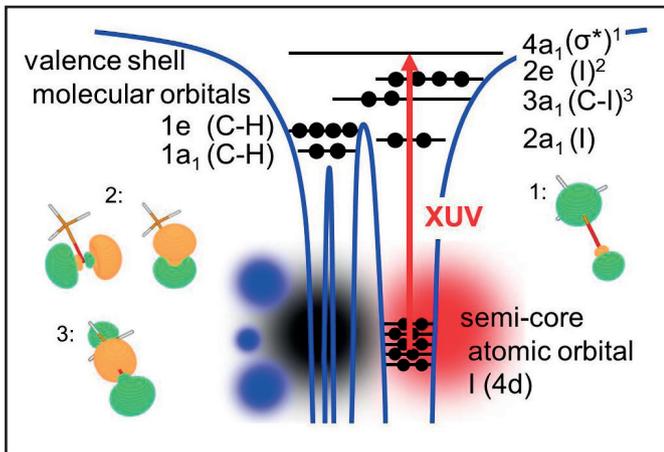


Abb. 1: Die XUV-Absorption aus einer kernnahen Schale in die Vakanzen in der Valenzschale ist elementspezifisch und abhängig von der lokalen chemischen Umgebung um das Reporteratom

Fig.1: XUV absorption from the core shell to vacancies in the valence shell are element specific and sensitive to the local chemical environment around the reporter atom.

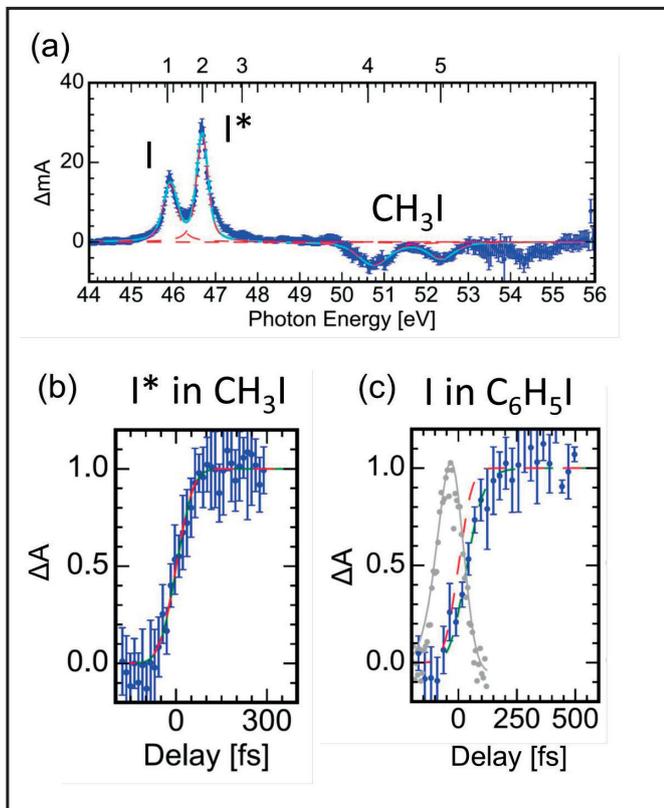


Abb. 2: (a) Transientes XUV-Aktionsabsorptionsspektrum der CH_3I Photodissoziation, d.h. die Differenz im XUV-Absorptionsspektrum vor und nach Photodissoziation. Absorptionslinien, die mit molekularem CH_3I assoziiert werden, verschwinden ($\Delta m_A < 0$), während zum atomarem Iod hin konvergierende Linien erscheinen ($\Delta m_A > 0$). (b), (c) Absorptionslinien, die zu atomarem Iod hin konvergieren, erscheinen unverzüglich in CH_3I , hingegen zeitverzögert in $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$, wie ein Vergleich mit der Apparatefunktion zeigt (rot).

Fig.2: (a) Transient XUV absorption action spectrum of photodissociation of CH_3I , i.e. the difference in the XUV absorption spectrum before and after photodissociation. Lines associated with molecular CH_3I are depleted while atomic iodine lines have appeared. (b),(c) Absorption lines converging to atomic iodine appear promptly in CH_3I , but time-delayed in $\text{C}_6\text{H}_5\text{I}$, as seen by comparing to the UV-XUV cross-correlation, convoluted with a step function (red).

MBI Interner Newsletter

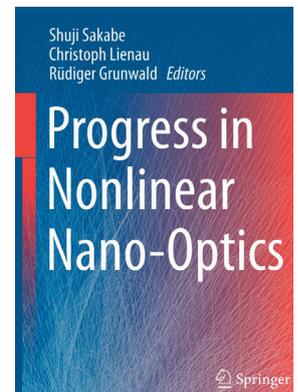
6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Allgemein/ General

Recently it was reported that the eBook edition of our book „*Progress in Nonlinear Nano-Optics*“, (Editors: M. Sakabe, C. Lienau, R. Grunwald, Springer-Verlag, Heidelberg, 2014) was among the 25% most downloaded eBooks in the relevant Springer Book Collection with 7,435 chapter downloads in the year 2015.

Contact: R. Grunwald, Tel. 1457

(ebook) ISBN 978-3-319-12217-5
(print book) ISBN 978-3-319-12216-8



Neue Mitglieder für die Leibniz-Gemeinschaft / New Institutes for the Leibniz Association

Die Leibniz-Gemeinschaft begünstigt den von der Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz von Bund und Ländern (GWK) gefassten Beschluss, vier Institute aus Berlin, Regensburg und Leipzig in die gemeinsame Forschungsförderung aufzunehmen. Die GEK folgt damit den Empfehlungen der Leibniz-Gemeinschaft.

The Leibniz Association welcomes the conclusion of the Joint Science Conference Gemeinsamen Wissenschaftskonferenz von Bund und Ländern (GWK) to accept four new institutes from Berlin, Regensburg and Leipzig, in the Leibniz-Association.

- Institut für Ost- und Südosteuropaforschung (IOS), Regensburg
- Geisteswissenschaftliches Zentrum Geschichte und Kultur Ostmitteleuropas (GWZO), Leipzig
- Zentrum Moderner Orient (ZMO), Berlin
- Zentrum für Allgemeine Sprachwissenschaft (ZAS), Berlin

Leibniz in Zahlen (2015)

• Einrichtungen	89
• Sektionen	5
• Anzahl Forschungsverbände	12
• Anzahl WissenschaftsCampi	12
• Mitarbeiter	18.476
• Davon Frauen	9848
• Beteiligung Graduiertenschulen	142
• Nachwuchsgruppen	190
• Betreute Doktoranden	3.950
• Internationale Kooperationen	4.471
• Anzahl von Kooperationsländern	139

Leibniz in Figures (2015)

• Institutions	89
• Sections	5
• Number of Research Alliances	12
• Number of ScientificCampi	12
• Staff	18.476
• Share of women	9848
• Participation in graduate schools	142
• Number of junior research groups	190
• Number of supervised doctoral candidates	3.950
• Number of international co-operation projects	4.471
• Number of co-operating countries:	139

<http://www.leibniz-gemeinschaft.de/ueber-uns/leibniz-in-zahlen/>

<http://www.leibniz-gemeinschaft.de/en/about-us/leibniz-in-figures/>

MBI Interner Newsletter

6. Jahrgang - Ausgabe 23 - August 2016

Termine - Save the date

Dienstag/Mittwoch 30./31. August 2016

The MBI Symposium
at Max-Born-Lecture Hall

Sonntag/Montag 25./26. September 2016

Wissenschaftlicher Beirat / Scientific Advisory Board
at Max-Born-Lecture Hall