

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Inhalte

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

Editorial

Liebe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter,

wir kennen das alle: Die Eltern kommen zu Besuch und es ist mal wieder an der Zeit ein wenig durchzulüften, die Bücherregale von Staub, der sich über die Zeit dort angesammelt hat, zu befreien, die alten Zeitschriften wegzuschmeißen, die sowieso keiner mehr lesen wird. Mit anderen Worten: es ist also Zeit, unser Haus vielleicht nicht grundlegend umzugestalten, aber es dennoch in einen schöneren und besseren Zustand zu verwandeln.

In einem sich alle 7 Jahre wiederholenden Verfahren wird das MBI im Mai 2019 evaluiert. Das Ziel der Evaluation, der sich alle Leibniz-Institute stellen müssen, ist die Bewertung der wissenschaftlichen Qualität des Instituts (gemessen an Publikationen, eingeladenen Vorträgen, Drittmittelleinnahmen und wissenschaftlichen Preisen) sowie, vielleicht sogar wichtiger, seiner Bedeutung auf der nationalen und internationalen Forschungslandkarte (gemessen an Forschungsk Kooperationen, vom Institut angebotenen Dienstleistungen, wissenschaftlichen Karrieren von (ehem.) MBI Mitarbeitern und an verantwortungsvollen Positionen, die innerhalb der Wissenschaftsgemeinschaft von MBI -Mitarbeitern eingenommen werden). Bei der letzteren Bewertung geht es darum, festzustellen, ob ein Institut wie das MBI in Deutschland im Jahre 2019 noch gebraucht wird.

Wenn ich mich in meinem Büro mit Besuchern oder Bewerbern unterhalte, dann beschreibe ich das MBI immer als eine Art „Kompetenzzentrum“. Mit anderen Worten ein Zentrum, an dem Experten- und Fachwissen zur Ultrakurzzeit-Laserphysik sowohl experimentell als auch theoretisch, gebündelt, weiterentwickelt und angewendet wird, um die Forschung zu ermöglichen, von der wir alle begeistert sind, und um ihre Verfügbarkeit für externe Nutzer zu gewährleisten, wo immer sie gebraucht wird. Ein Ort, an dem Forschung stets herausfordernd, innovativ und bahnbrechend sein sollte, in einer Qualität, die kaum von anderen Instituten erreicht werden kann, die nicht über so eine einzigartige Ballung von experimentellen und theoretischen Forschern verfügen, wie sie das MBI über die Jahre zusammenbringen konnte, und die nicht auf so eine einzigartige Ausstattung zurückgreifen können, wie sie das

Editorial

Dear Members of the MBI,

We have all been there. The parents are coming to town, so it is time to vacuum the house and dust off the bookshelves that have been begging to do so for some time already, and time to throw out the old magazines that we are not going to read anymore anyway; time, in other words, to not make our house fundamentally different from the house we normally live in, but to just turn our house into a somewhat better version of itself.

In a procedure that is repeated every 7 years, MBI will be evaluated in May 2019. The purpose of this evaluation, which all Leibniz Institutes undergo, is an assessment of the scientific quality of the institute (as illustrated by publications, invited talks, income from third party projects and scientific awards), as well as – even more importantly – the role that the institute plays in the national and international research landscape (as illustrated by research collaborations, services provided by the institute, the career development of scientists trained at the MBI, and positions of responsibility held by the MBI within the international research community). The goal of the latter assessment, in other words, is to determine whether Germany anno 2019 still needs an institute like the MBI.

When I meet with visitors or job applicants in my office, I always explain that I see the MBI as a kind of “expertise center”. A place, in other words, where sophisticated knowledge and expertise on ultrafast laser physics is maintained, further developed and applied, both experimentally and in theoretical work, to enable the research that we are all fascinated by, and to enable its availability to external users if and when needed. A place, where research needs to be bold, ambitious, innovative and ground-breaking, in ways that are hard to match by other research institutes that either lack the unique concentration of experimental and theoretical scientists that the MBI has been able to assemble over the years, or the unique facilities that the institute has been able to develop and continues to develop. Then, and only then, does the institute satisfy the expectations that justifiably accompany its status as a research institute with

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

MBI in der Vergangenheit aufgebaut hat und weiter entwickeln wird. Dann, und nur dann, werden die berechtigten Erwartungen erfüllt, die an ein Institut gestellt werden, dessen institutionelles Budget jenes von Forschergruppen an Universitäten bei weitem übertrifft. Und nur dann können auch wir zufrieden in die Zukunft des Instituts blicken, für zumindest weitere 7 Jahre.

Es ist klar, dass vom Ergebnis der Evaluierung im nächsten Jahr eine Menge abhängt und dass das MBI die jetzt beginnenden Vorbereitungen entsprechend ernst nimmt. Am letzten Donnerstag und Freitag, den 24. und 25. Mai, haben sich Wissenschaftler des MBI zu einer zweitägigen Klausurtagung in Zeuthen getroffen, um die Strategie des MBI für die Evaluierung zu diskutieren. Wir haben uns harte Fragen gestellt, zur Forschungsexzellenz, zur internationalen Wettbewerbsfähigkeit und Sichtbarkeit, wie tragfähig Forschungsprogramm und organisatorische Struktur des MBI in den nächsten Jahren sein werden. Das Treffen hat viele Aspekte gezeigt, wo das MBI sehr gut aufgestellt ist, es wurden aber auch Themen angesprochen, in denen das MBI besser sein kann und daher auch besser sein sollte.

Es ist noch genügend Zeit, fast noch ein Jahr, bis die Eltern vorbeikommen, aber um das Haus rechtzeitig in Ordnung zu bringen müssen die Vorbereitungen jetzt in Gang kommen.

Für das Direktorium:
Marc Vrakking

an institutional budget significantly surpassing the budgets that are available to research groups at universities, and only then can we be confident that the future of the institute is secure for at least another 7 years.

From the above it is clear that there is a lot riding on the outcome next year's evaluation, and correspondingly the MBI takes the preparations for this event very seriously, and is starting these preparations now. Last Thursday and Friday May 24th and 25th, senior researchers of the MBI met for a two-day retreat in Zeuthen in order to discuss MBI's strategy for the evaluation, in order to ask ourselves hard questions about MBI's research excellence, international competitiveness and visibility, in other words, the viability of MBI's research program and organizational structure in the coming years. The retreat revealed many aspects where the MBI is performing at a high level, but also aspects where the MBI can, and therefore should be better.

It is still some time, almost one year, until the parents are coming. But preparations are getting underway at the MBI to put our house in order.

For the Board of Directors:
Marc Vrakking

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts
(Stand: 09.05.2018 - alphabetische Reihenfolge)

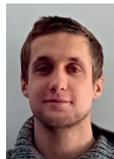
Pascal Engl
Masterstudent A2
Tel. 1234
E-Mail: engl@mbi-berlin.de
Beginn: 16.04.2018



Dr. Sajjad Hoseinkhani
Wissenschaftler C3
Tel. 1476
E-Mail: hoseinkh@mbi-berlin.de
Beginn: 01.05.2018



Maciej Kowalczyk
Gastwissenschaftler A3
Tel. 1288
E-Mail: kowalczy@mbi-berlin.de
Beginn: 01.02.2018



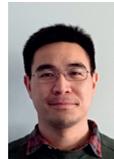
Mikhail Osolodkov
Doktorand A2
Tel. 1212
E-Mail: osolodko@mbi-berlin.de
Beginn: 20.04.2018



Jakob Schauss
Doktorand C1
Tel. 1496
E-Mail: schauss@mbi-berlin.de
Beginn: 01.05.2018



Rico Mayro P. Tanyag
Wissenschaftler A1
Tel. 1251
E-Mail: tanyag@mbi-berlin.de
Beginn: 01.03.2018



Suresh Yarlagadda
Wissenschaftler A1
Tel. 1207
E-Mail: yarlagad@mbi-berlin.de
Beginn: 19.03.2018



Ausgeschiedene: (Stand: 09.05.2018 - alphabetische Reihenfolge)

Abdullah Mohammed Abduljaleel	stud./wiss. Hilfskraft, A2
Prof. Dr. André Bandrauk	Gastwissenschaftler T1
Jan Brederick	IT
Viktor Eichmann	Praktikant, B2
Johan Hummert	Doktorand, A2
Janne Hyyti	Doktorand, C2
Sobhy Kholaf	Master, B1
Daniela Littmann	IT
Leon Löchner	Master, A3
Elias Mc Garvey Blumenthal	Praktikant, B1
Sebastian Raabe	Doktorand, A1
Felicita Stolberg	Master, B2

Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/
Master- & Diplomarbeiten

Lorenz von Grafenstein

Generation of Intense Few-Cycle Pulses in the Mid-Wave Infrared
Dissertation (2018) HU Berlin

F.K. Freyse

An electrostatic ion beam trap for structural imaging of transition state dynamics
Master (2017) HU Berlin

M. Schloz

Polarization control of attosecond pulse trains by bicircular driving fields
Master (2017) HU Berlin

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

PREIS/PRIZE

ERC Advanced Grant

Röntgenschnappschüsse von reagierenden Säuren und Basen

Erik T. J. Nibbering erhält "ERC Advanced Grant" für richtungsweisende Grundlagenforschung

Dr. Erik T. J. Nibbering erhält einen "Advanced Grant" des Europäischen Forschungsrats (ERC). Ziel des ausgezeichneten Projekts ist die Erforschung extrem schneller Prozesse, die den Protonenaustausch zwischen Säuren und Basen bestimmen. Der "ERC Advanced Grant" ist mit 2,5 Millionen Euro dotiert und wird an renommierte Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus ganz Europa für herausragende Forschungsvorhaben vergeben.



Erik T. J. Nibbering, Leiter der Abteilung Femtosekundenspektroskopie von molekularen Systemen am MBI, ist einer der international führenden Wissenschaftler auf dem Gebiet der Erforschung ultraschneller chemischer Reaktionen. Hierzu zählen insbesondere der Protonentransfer zwischen Säuren und Basen, der Elektronentransfer in Donor-Akzeptor-Komplexen und Trans-/Cis-Isomerisationen. In den letzten Jahren hat er vor allem die Dynamik von Wasserstoffbrückenstrukturen zwischen Säuren und Basen und hydratisierten Protonen auf ultrakurzen Zeitskalen untersucht.

Wie Säuren und Basen in Wasser reagieren, ist eine Hauptfrage seit den Gründerjahren der modernen Chemie. In den letzten Jahrzehnten sind mikroskopische Mechanismen von Protonenaustausch zwischen Säuren und Basen - und insbesondere die bedeutende Rolle, die Wasser dabei spielt - intensiv erforscht worden. Die Ultrakurzzeitspektroskopie hat dabei gezeigt, dass die Elementarschritte von wässrigem Protonentransfer auf Zeitskalen von Femto- bis Pikosekunden stattfinden (1 Femtosekunde = 10^{-15} s = 1 Millionstel einer Milliardstel Sekunde). Wässrige Säure-Base-Neutralisierung findet hauptsächlich schrittweise über Wasser statt, das sich zwischen Säuren und Basen aufhält. Die Ultrakurzzeitexperimente, die molekulare Übergänge von ultravioletten, sichtbaren und mittleren infraroten Spektralbereichen untersuchen, geben jedoch nur einen kleinen Einblick in die elektronischen Strukturen von Säuren, Basen und die Wassermoleküle, die Protonentransfer in kondensierter Phase ermöglichen. Mit sanfter Röntgenabsorptionsspektroskopie (XAS) lässt sich hingegen die elektronische Struktur elementspezifisch bestimmen.

Ziel des aktuellen Forschungsvorhabens ist es, eine "steady-state" und zeitaufgelöste sanfte Röntgenspektroskopie von Säuren und Basen zu entwickeln. Dabei wird eine neuartige Flachstrahltechnologie mit unterschiedlichen Röntgenquellen eingesetzt, beispielsweise Synchrotrons oder "table-top" laserbasierte höhere Harmonische-Systeme. Die Erforschung der elektronischen Struktur- und Dynamik der Elementarschritte des wässrigen Protonentransports wird zu einem besseren Verständnis der Rolle des Wassers in Lösungen beitragen - dies gilt auch für spezielle Fälle wie die Wasserstoff-Brennstoffzelle oder biologische Zellmembranproteine.

Weitere Informationen zu Erik T. J. Nibbering stehen zur Verfügung unter: <http://staff.mbi-berlin.de/nibberin/>
zum ERC Grant unter: <https://erc.europa.eu/>.

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

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

ERC Advanced Grant

X-ray snapshots of reacting acids and bases

Erik T. J. Nibbering receives an ERC Advanced Grant for groundbreaking basic research

Dr. Erik T. J. Nibbering of the Max Born Institute for Nonlinear Optics and Short Pulse Spectroscopy (MBI) in Berlin receives an Advanced Grant from the European Research Council (ERC). Goal with this prestigious award is to investigate and elucidate the elementary steps of aqueous proton transfer dynamics between acids and bases. The ERC Advanced Grant is endowed with 2.5 million euro and awarded to well-established top researchers in Europe pursuing scientifically excellent projects.

Dr. Erik T. J. Nibbering, head of the department „Femtosecond Spectroscopy of Molecular Systems“ at MBI, has a major track record in time-resolved spectroscopy of ultrafast chemical reactions, in particular proton transfer between acids and bases, electron transfer in donor-acceptor complexes, and trans/cis isomerization. In recent years his activities have focused on the dynamics of the hydrogen bond structure of photoacid-base complexes and of hydrated protons.

How acids and bases react in water is a question raised since the pioneering days of modern chemistry. Recent decades have witnessed an increased effort in elucidating the microscopic mechanisms of proton exchange between acids and bases and the important mediating role of water in this. With ultrafast spectroscopy it has been shown that the elementary steps in aqueous proton transfer occur on femtosecond to picosecond time scales (1 femtosecond = 10^{-15} s = 1 millionth of a billionth of a second). Aqueous acid-base neutralization predominantly proceeds in a sequential way via water bridging acid and base molecules. These ultrafast experiments probing molecular transitions in the ultraviolet, visible and mid-infrared spectral ranges, though, only provide limited insight into the electronic structure of acids, bases and the water molecules accommodating the transfer of protons in the condensed phase. Soft-x-ray absorption spectroscopy (XAS), probing transitions from inner-shell levels to unoccupied molecular orbitals, is a tool to monitor electronic structure with chemical element specificity.

The aim is now to develop steady-state and time-resolved soft-x-ray spectroscopy of acids and bases. Here novel liquid flatjet technology is utilized with soft-x-ray sources at synchrotrons as well as table-top laser-based high-order harmonic systems. Resolving the electronic structural dynamics of elementary steps of aqueous proton transport will furthermore elucidate the role of mediating water in bulk solution, and in specific conditions such as hydrogen fuel cells or trans-membrane proteins.

Further information on Dr. Erik T. J. Nibbering can be found at: <http://staff.mbi-berlin.de/nibbering/>
and on ERC Grants at: <http://erc.europa.eu/>.

Contact: Erik T. J. Nibbering, Tel. 1477

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Vereinbarkeit Beruf und Familie



Reconciliation of work and family life

BuF: Re-Auditierung des Zertifikates

Vor beinahe drei Jahren hat das MBI die Zertifizierung der „berufundfamilie GmbH“ als familienfreundliches Institut erhalten. Auf dem Wege zur Re-Auditierung, die jetzt ansteht, hatten wir in den vergangenen drei Jahren eine umfangreiche Zielvereinbarung zu erfüllen. In diesen ersten Jahren konnten zahlreiche Maßnahmen umgesetzt werden (Arbeitszeit, Termine von Veranstaltungen, Informationen zum Service für Familien, Gesundheitstag, etc.), die zusammen zu einer Sensibilisierung für die Vereinbarkeit von Familie und Beruf geführt haben.

Im Rahmen eines Strategieworkshops am 15. Mai wurde unter der Leitung der Auditorin Gabriele Eylers zusammen mit den Direktoren und einigen Abteilungs- und Gruppenleitern analysiert, ob und inwieweit das MBI seine Zielvorgaben erfüllt hat. Außerdem wurden die neuen inhaltlichen Felder für eine erneuerte Zielvereinbarung abgesteckt.

Beim folgenden Auditierungsworkshop am 18. Mai nahm ein größerer Kreis von Kolleginnen und Kollegen aus dem gesamten MBI teil, ob aus der Wissenschaft, dem technischen Bereich oder der Verwaltung. Das Ziel bestand darin, die im Strategieworkshop entwickelten großen Felder mit detaillierten Zielen und Maßnahmen zu füllen. Auch hier leitete Frau Eylers gekonnt straff durch die Sitzung; sie kommentierte und sortierte die vielen Vorschläge und Ideen und wird nun daraus eine Zielvereinbarung entwickeln, die uns in Kürze zugehen wird.

Die Zielvereinbarung für die nächsten drei Jahre wird dann von den Direktoren mit der Audit berufundfamilie GmbH geschlossen und bildet die Grundlage für die weitere Entwicklung der Vereinbarkeit von Familie und Beruf am MBI. Sobald die Dokumente verabschiedet sind, informieren wir Sie an gewohnter Stelle im Intranet:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/ge_audit.html

Herzlichen Dank nochmals an alle Beteiligten, die zum Gelingen der Workshops beigetragen haben.

Kontakt: A. Grimm, Tel. 1500

BuF: Re-Audit

Three years ago MBI was certified as a family friendly institute by the „berufundfamilie GmbH“. To undergo the re-audition now, we had to accomplish a variety of objectives over the last three years. Several measures have been implemented (according to working time, scheduling of events, information on services for families, health day, etc.) that all together contribute to an enhanced awareness of issues related to the reconciliation of family and work life.

In a strategy workshop hosted by our auditor Gabriele Eylers on May 15, the directors and department heads analyzed how the goals of the recent three-year period have been fulfilled. In addition, the topical areas for new objectives were discussed.

The following audition workshop on May 18 was attended by a larger group of MBI staff members (scientists, technicians, administration, etc.). The goal of the workshop was to fill the broader topical fields that were the output of the first workshop with concrete goals and measures for the next three years. Again, Frau Eylers chaired the session, commented on the suggestions and classified the ideas. Now she will compile a target agreement that we expect to receive soon.

It will be then discussed and adopted by the directors and the berufundfamilie GmbH and it will serve as a basis for the further development of reconciling work and family life at MBI. As soon as the documents will be negotiated we will inform you in the newsletter and at the known intranet webpage:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_audit/ge_audit.html

Again, thank you very much to everyone who was contributing to the workshops.

Contact: A. Grimm, Tel. 1500

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Vereinbarkeit Beruf und Familie/



Reconciliation of work and family life

Gesundheitstag

Am 19.3.2018 wurde durch das WISTA Gesundheitsmanagement ein Gesundheitstag angeboten, der Campus-übergreifend durchgeführt worden ist. Das MBI hat seine Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter eingeladen und für zwei Stunden freigestellt, um die zahlreichen Angebote im WISTA-Gebäude besuchen zu können. Nicht zuletzt stand das Thema „Gesundheitstag“ auch auf der Agenda des MBI im Rahmen der Auditierung „berufundfamilie“.

Es wurden die folgenden Themen angeboten:

- Je zwei rotierende Workshops zum Handlungsfeld **Bewegung** - „Faszientraining“ und „Bewegte Pause“, **Stress** - „Yoga“ und „Achtsamkeit im Job“, **Ernährung** - „Snacken oder Essen?“ und „Berliner-Brandenburger Superfood“
- ein Vortrag zum Thema *“Motivation zu mehr Bewegung im Alltag“*
- Interessante und innovative Aktionsmodule zu den Handlungsfeldern „Bewegung“, „Ernährung“ und „Stress“ - z.B. „Icaros (Flugsimulator)“, „Back-Check“ und „Entspannungskoaching“
- Möglichkeit zur Anmeldung der im April 2018 beginnenden Auftaktseminare „Gesunde Führung“ sowie der präventiven Kursangebote

Viele Mitarbeiter nutzten die Angebote, insbesondere die Aktionsmodule waren sehr gefragt. Auch die Kurse, wie man am Arbeitsplatz durch kurze Yoga-Übungen wieder mehr Konzentration erlangen kann, waren gut besucht. Es ist noch nicht ganz klar, ob die WISTA den Gesundheitstag in Zukunft jährlich anbieten wird; die Ergebnisse des ersten Jahres waren aber durchaus positiv und wir hoffen auf eine Wiederholung.

Kontakt: M. Rink, Tel. 1551

Health Day

On March 19, a health care day was organized by the Wista-Health Care Management for the entire Campus Adlershof. In accordance with the Directors all staff members of MBI were invited to attend this Wista-Health Care Day in March and to seize the opportunity to concentrate on health topics during the preparation week for re-audit of reconciliation of work and family life.

At this occasion the following central topics were offered:

- Two rotating workshops for **exercise** „fascias training“ and „short break workouts“ - **stress recovery** - „yoga and mindfulness at work“, **nutrition** - „snacking or eating“ and „Berlin-Brandenburg Superfood“;
- a lecture on „Motivation to take more exercise in everyday life“;
- a multitude of action modules in the fields of „exercises, nutrition and stress recovery - e.g. Icaros flight simulator, back-check and relaxation coaching“;
- The possibility to participate in starter seminars for health management and preventive courses as of April 2018.

Many MBI staff members joined the offered exercises, especially the action modules and the Yoga courses have been well attended. It's not clear, if the WISTA will offer a health day on a yearly basis, but the results of the first event were quite positive and we hope for a repetition.

Contact: M. Rink, Tel. 1551

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Projekteinwerbungen

Bereich B

Projektbezeichnung: Aufträge Reparatur/Service
diverse Neuanfertigung von 2 Hochspannungsschaltern
für Pockelszellen

Laufzeit: 09.02.2018 - 30.06.2018

Projektleiter: I. Will

Geldgeber: DESY Zeuthen

Projektbezeichnung: Heraeus-Klausurtagung
30.05.2018 - 01.06.2018 Hüttenseminar

Laufzeit: 01.05.2018 - 31.12.2018

Projektleiter: C. von Korff Schmising

Geldgeber: Heraeus-Stiftung

Bereich C

Projektbezeichnung: EU XRayProton 788704 ERC Advanced
Grant

XRayProton – Ultrafast Structural Dynamics of Elementary
Water-Mediated Proton Transport Processes

Laufzeit: 01.09.2018 - 31.08.2023

Projektleiter: E.T.J. Nibbering

Geldgeber: EU

Projektbezeichnung: Industrie - Messungen diverse
Labormessungen von Absorptions- und
Transmissionseigenschaften von Filtern

Laufzeit: 24.04.2018 - 01.08.2018

Projektleiter: U. Griebner

Geldgeber: PROTECT – Laserschutz GmbH

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Forschungsergebnisse

Lasergetriebene Elektronenrekollision erinnert sich an die Molekülorbitalstruktur

Wissenschaftler vom MBI haben durch eine Kombination modernster Experimente und numerischer Simulationen eine grundlegende Annahme der Starkfeld-Physik untersucht. Ihre Ergebnisse verfeinern unser Verständnis von starkfeldgetriebenen Prozessen, wie der Erzeugung hoher Harmonischer (HHG) und der laserinduzierten Elektronendiffraktion (LIED). Die Forschungsergebnisse sind in „Science Advances“ erschienen.

Starke Laserpulse im Infrarotbereich können ein Elektron aus einem Molekül herauslösen (Ionisierung), es dann in den freien Raum hinausbeschleunigen und seine Bewegungsrichtung umkehren (Propagation) und es schließlich wieder mit dem Molekül zur Kollision bringen (Rekollision). Diese Prozesse bilden das sogenannte Dreischrittmodell, das innerhalb der Starkfeld- und Attosekunden-Physik breite Anwendung findet. Bei der Rekombination kann das Elektron dann z.B. mit seinem Mutterion rekombinieren, was zur Erzeugung hoher Harmonischer führt, oder elastisch an ihm streuen, wie bei der laserinduzierten Elektronendiffraktion.

Eine häufig gebrauchte grundlegende Annahme in der Attosekunden-Physik ist, dass die ursprüngliche Struktur des ionisierten Elektrons im Propagationsschritt „ausgewaschen“ wird, das Elektron also die Information über das Orbital, aus dem es stammt, verliert. Bis jetzt wartete diese Annahme in Molekülen noch auf ihre Überprüfung.

Eine kombinierte experimentelle und theoretische Studie am Max-Born-Institut hat nun die starkfeldgetriebene Elektronenrekollision im Molekül 1,3-trans-Butadien untersucht. Bei diesem Molekül führt die Wechselwirkung mit dem Laserfeld vor allem zur Ionisierung der beiden am schwächsten gebundenen Elektronen, die sehr unterschiedliche Dichten aufweisen (siehe Abbildung 1). Die anspruchsvollen Experimente und Simulationen ermöglichten es den Wissenschaftlern, für beide zurückkehrenden Elektronen getrennt die Rückstreuwahrscheinlichkeit in große Streuwinkel zu bestimmen. Sowohl im Experiment als auch in den Simulationen unterschied sich diese Wahrscheinlichkeit deutlich zwischen den beiden Elektronen. Diese Befunde zeigen klar, dass die zurückkehrenden Elektronen strukturelle Informationen über ihren Ausgangszustand enthalten.

Research Highlights

Laser-driven electron recollision remembers molecular orbital structure

Scientists from the MBI in combined state-of-the-art experiments and numerical simulations to test a fundamental assumption underlying strong-field physics. Their results refine our understanding of strong-field processes such as high harmonic generation (HHG) and laser-induced electron diffraction (LIED). The results have been published in „Science Advances“.

Strong infrared laser pulses can extract an electron from a molecule (ionization), accelerate it away into free space, then turn it around (propagation), and finally collide it with the molecule (recollision). This is the widely used three-step model of strong-field physics. In the recollision step, the electron may, for example, recombine with the parent ion, giving rise to high harmonic generation, or scatter elastically, giving rise to laser-induced electron diffraction.

One of the commonly used assumptions underlying attosecond physics is that, in the propagation step, the initial structure of the ionized electron is „washed out“, thus losing the information on the originating orbital. So far, this assumption was not experimentally verified in molecular systems.

A combined experimental and theoretical study at the Max Born Institute Berlin investigated the strong-field driven electron recollision dynamics in the 1,3-trans-butadiene molecule. In this molecule, the interaction with the strong laser field leads mainly to the ionization of two outermost electrons exhibiting quite different densities, see Figure 1. The state-of-the-art experiments and simulations then allowed the scientists to measure and calculate the high-angle rescattering probability for each electron separately. These probabilities turned out to be quite different both in the measurements and in the simulations. These observations clearly demonstrate that the returning electrons do retain structural information on their initial molecular orbital.

Originalpublikation:

"Molecular orbital imprint in laser-driven electron recollision"
Felix Schell, Timm Bredtmann, Claus Peter Schulz, Serguei Patchkovskii, Marc J. J. Vrakking and Jochen Mikošch
Science Advances, Vol. 4, no. 5, eaap8148 (2018), DOI: 10.1126/sciadv.aap8148

Contact: J. Mikošch, Tel. 1295, T. Bredtmann, Tel.1251

Electron 1



Electron 2



Abb1: Freigesetzte Elektronenwellenpakete kurz nach der Starkfeldionisierung von Elektron 1 und 2 in 1,3-trans-Butadien.

Fig. 1: Continuum electronic wavepackets for strong-field ionization channel 1 and 2 in 1,3-trans-butadiene shortly after ionization.

Forschungsergebnisse

Freigesetzt lassen sich Elektronen besser fangen

Forscher der UNIGE und des MBI in Berlin haben erstmalig ein Elektron in einen Doppelzustand versetzt, in dem es weder ganz frei, noch an den Atomkern gebunden ist. Damit bestätigen sie eine Hypothese aus den 1970er Jahren.

Atome bestehen aus einem Atomkern sowie Elektronen, die an diesen gebunden sind und ihn umkreisen. Die Elektronen lassen sich auch aus ihrem Atom herauslösen, etwa durch das starke elektrische Feld eines Lasers, der die anziehende Kraft des Atomkerns überwindet. Vor einem halben Jahrhundert schon fragte sich der Theoretiker Walter Henneberg, ob es möglich sei, mit einem Laserpuls Elektronen so aus einem Atom freizusetzen, dass sie trotzdem noch in der Nähe ihres Atomkerns bleiben. Viele Wissenschaftler hielten dies für unmöglich. Kürzlich jedoch gelang es Physikern von der Universität Genf (UNIGE) in der Schweiz sowie vom Max-Born-Institut (MBI) in Berlin, diese Hypothese zu bestätigen. Zum ersten Mal schafften sie es, die Form des Laserpulses zu gut zu kontrollieren, dass ein damit bestrahltes Elektron frei wurde und zugleich an den Atomkern gebunden blieb. Die Forscher konnten außerdem die Elektronenstruktur des Atoms mit ihrem Laserstrahl gezielt beeinflussen. Darüber hinaus gelang es ihnen sogar, diese ungewöhnlichen Zustände zu nutzen, um Laserlicht zu verstärken. Die Wissenschaftler konnten aber auch eine „verbotene Zone“ ausmachen. In diesem „Death Valley“ („Tal des Todes“) genannten Bereich verloren sie jede Kontrolle über das Elektron. Diese Ergebnisse, die nun im Fachblatt „Nature Physics“ erschienen sind, erschüttern die bisherigen Vorstellungen von Ionisationsprozessen von Materie.

Schon seit den 1980er Jahren wurden viele Experimente durchgeführt, um die Hypothese des Theoretikers Walter Henneberg zu bestätigen: Ein Elektron kann in einen Doppelzustand versetzt werden, in dem es weder völlig frei, noch fest an seinen Atomkern gebunden ist. Gefangen im Laserstrahl, würde das Elektron dazu gezwungen sein, sich abwechselnd in Richtung Atomkern und wieder von ihm weg zu bewegen. Auf diese Weise würde es sowohl das elektrische Feld des Lasers als auch das des Atomkerns spüren. Bei einem solchen Doppelzustand sollte es möglich sein, die Bewegung des Elektrons im Wechselspiel dieser beiden elektrischen Felder zu kontrollieren und damit Atome mit neuartiger Elektronenstruktur zu erzeugen, die sich mit Hilfe des Laserlichts einstellen lässt. Doch ist das wirklich machbar?

Die natürlichen Schwingungen des Elektrons ausnutzen

Je stärker ein Laserstrahl ist, desto einfacher sollte es sein, damit Atome zu ionisieren - mit anderen Worten, ihnen mindestens ein Elektron aus dem anziehenden elektrischen Feld des Atomkerns zu entreißen und in die Umgebung freizusetzen.

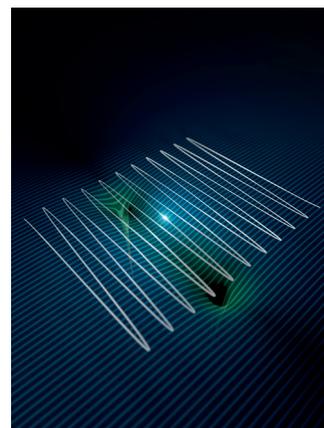
Research Highlights

Freeing electrons to better trap them

For the first time, researchers from UNIGE and MBI in Berlin have placed an electron in a dual state - neither freed nor bound - thus confirming a hypothesis from the 1970s.

Atoms are composed of electrons moving around a central nucleus they are bound to. The electrons can also be torn away, overcoming the confining force of their nucleus, using the powerful electric field of a laser. Half a century ago, the theorist Walter Henneberger wondered if it was possible to free an electron from its atom with the laser field, but still make it stay around the nucleus. Many scientists considered this hypothesis to be impossible. However, it was recently successfully confirmed by physicists from the University of Geneva (UNIGE), Switzerland, and the Max Born Institute (MBI) in Berlin, Germany. For the first time, they managed to control the shape of the laser pulse to keep an electron both free and bound to its nucleus, and were at the same time able to regulate the electronic structure of this atom dressed by the laser. What's more, they also made these unusual states amplify laser light. They also identified a no-go area. In this area nicknamed „Death Valley“, physicists lose all their power over the electron. These results shatter the usual concepts related to the ionisation of matter. The results have been published in the journal Nature Physics.

Since the 1980s, many experiments have tried to confirm the hypothesis advanced by the theorist Walter Henneberger: an electron can be placed in a dual state that is neither free nor bound. Trapped in the laser, the electron would be forced to pass back and forth in front of its nucleus, and would thus be exposed to the electric field of both the laser and the nucleus. This dual state would make it possible to control the motion of the electrons exposed to the electric field of both the nucleus and the laser, and would let the physicists to create atoms with „new“, tunable by light, electronic structure. But is this really possible?



Schematische Darstellung des Kramers-Henneberger-Potenzials, das die Mischung aus Atompotenzial und starkem Laserfeld zeigt. Quelle: UNIGE - Xavier Ravinet

Schematic illustration of the Kramers-Henneberger potential formed by a mixture of the atomic potential and a strong laser field. Source: UNIGE - Xavier Ravinet

„Aber sobald die Elektronen frei sind, verlassen sie ihre Atome nicht einfach so wie ein Zug den Bahnhof, sie spüren immer noch das elektrische Feld des Lasers“, erklärt Jean-Pierre Wolf, Professor am Institut für Angewandte Physik an der Universität Genf. „Deshalb wollten wir wissen, ob es möglich wäre, die Elektronen nach ihrer Freisetzung im Laserstrahl gefangen zu halten und sie dazu zu bringen, sich weiterhin in der Nähe ihres Atomkerns aufzuhalten, so wie Walter Henneberg es vorgeschlagen hatte“, fügt er hinzu.

Die einzige Möglichkeit hierzu besteht darin, die passende Form für den eingesetzten Laserpuls zu finden, der das Elektron zu absolut identischen Schwingungen in Richtung Atomkern und wieder von ihm weg zwingt. Dadurch bleiben seine Energie und sein Zustand stabil. „Das Elektron oszilliert natürlicherweise im Laserfeld, aber wenn die Stärke des Laserfelds sich ändert, verändert sich auch die Oszillation des Elektrons. Und das bringt das Elektron dazu, auch sein Energieniveau und damit seinen Zustand ständig zu wechseln und eventuell auch das Atom gänzlich zu verlassen. Das macht die Beobachtung solcher ungewöhnlichen Zustände so schwierig“, ergänzt Misha Ivanov, Professor für Theoretische Physik am MBI Berlin.

„Tal des Todes“ mit passender Laserintensität umgehen

Die Physiker probierten verschiedene Laserintensitäten aus, um die freigesetzten Elektronen zu regelmäßigen Oszillationen anzuregen. Dabei machten sie eine überraschende Entdeckung: „Entgegen der natürlichen Erwartungen - dass ein Laser ein Elektron umso eher freisetzen sollte, je stärker er ist - stellten wir fest, dass es eine bestimmte Grenze für die Intensität gibt, ab der wir ein Atom nicht mehr ionisieren können“, bemerkt Misha Ivanov. „Oberhalb dieser Grenze können wir das Elektron wieder kontrollieren.“ Die Forscher taufte diese Grenze „Death Valley“ nach dem Vorschlag von Professor Joe Eberly von der University of Rochester.

Bestätigung der alten Hypothese könnte Laser-Theorie revolutionieren

Indem sie das Elektron in einen solchen Doppelzustand versetzten, in dem es weder ganz frei, noch an den Atomkern gebunden ist, konnten die Forscher dessen Schwingungen nach Wunsch kontrollieren. Das ermöglicht es auch, die Elektronenstruktur des Atoms gezielt zu beeinflussen. Nach einigen Justierungen gelang es den Physikern von UNIGE und MBI dann zum ersten Mal, ein Elektron aus einem Atomkern zu befreien und zugleich in dessen Nähe in einem Laserfeld festzusetzen, so wie Walter Henneberg vorgeschlagen hatte. „Wir haben ein Laserfeld mit einer Intensität von 100 Billionen Watt pro Quadratzentimeter erzeugt und konnten so das „Tal des Todes“ überwinden und die Elektronen in der Nähe ihres Atomkerns festhalten, und zwar über ein Periode normaler Oszillationen im elektrischen Feld des Lasers“, sagt Jean-Pierre Wolf enthusiastisch. Zum Vergleich: Die Intensität der

Leveraging the natural oscillations of the electron

The more intense a laser is, the easier should it be to ionise the atom - in other words, to tear the electrons away from the attracting electric field of their nucleus and free them into space.

„But once the atom is ionised, the electrons don't just leave their atom like a train leaves a station, they still feel the electric field of the laser“, explains Jean-Pierre Wolf, a professor at the applied physics department of the UNIGE Faculty of Sciences.

„We thus wanted to know if, after the electrons are freed from their atoms, it is still possible to trap them in the laser and force them to stay near the nucleus, as the hypothesis of Walter Henneberger suggests“, he adds.

The only way to do this is to find the right shape for the laser pulse to be applied, to impose oscillations on the electron that are exactly identical, so that its energy and state remain stable. „The electron does naturally oscillate in the field of the laser, but if the laser intensity changes these oscillations also change, and this forces the electron to constantly change its energy level and thus its state, even leaving the atom. This is what makes seeing such unusual states so difficult“, adds Misha Ivanov, a professor at the theoretical department of MBI in Berlin.

Modulating laser intensity to avoid Death Valley

The physicists tested different laser intensities so that the electron freed from the atom would have steady oscillations. They made a surprising discovery. „Contrary to natural expectations that suggest that the more intense a laser is, the easier it frees the electron, we discovered that there is a limit to the intensity, at which we can no longer ionise the atom“, observes Misha Ivanov. „Beyond this threshold, we can control the electron again“. The researchers dubbed this limit „Death Valley“, following the suggestion of Professor Joe Eberly from the University of Rochester.

Confirming an old hypothesis to revolutionise physics theory

By placing the electron in a dual state which is neither free nor bound, the researchers found a way to manipulate these oscillations as they like. This enables them to directly work on the electronic structure of the atom. After several adjustments, for the first time, physicists from UNIGE and MBI were able to free the electron from its nucleus, and then trap it in the electric field of the laser, as Walter Henneberger suggested.

„By applying an intensity of 100 trillion watts per cm², we were able to go beyond the Death Valley threshold and trap the electron near its parent atom in a cycle of regular oscillations within the electric field of the laser“, Jean-Pierre Wolf says enthusiastically. As a comparison, the intensity of the sun on the earth is approximately 100 watts per m².

„This gives us the option of creating new atoms dressed by the field of the laser, with new electron energy levels“, explains

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Sonnenstrahlen auf der Erde liegt bei nur rund 100 Watt pro Quadratmeter.

„Das gibt uns die Möglichkeit, durch die Bestrahlung mit passendem Laserlicht neuartige Atomzustände zu erzeugen, deren Elektronen ganz neue Energieniveaus aufweisen“, erklärt Jean-Pierre Wolf. „Früher hielt man es für unmöglich, solche Doppelzustände zu erzeugen, und jetzt haben wir das Gegenteil bewiesen. Darüber hinaus haben wir herausgefunden, dass Elektronen in solchen Zuständen Licht verstärken können. Das wird eine fundamentale Rolle bei neuen Theorien und Vorhersagen spielen, die die Ausbreitung starker Laserstrahlen in Gasen beschreiben, etwa in Luft“, schließt Wolf.

Jean-Pierre Wolf. „We previously thought that this dual state was impossible to create, and we've just proved the contrary. Moreover, we discovered that electrons placed in such states can amplify light. This will play a fundamental role in the theories and predictions on the propagation of intense lasers in gases, such as air“, he concludes.

Contact: M. Ivanov, Tel. 1210

Originalpublikation: Nature Physics (2018), DOI:10.1038/s41567-018-0105-0

Mary Matthews, Felipe Morales, Alexander Patas, Albrecht Lindinger, Julien Gateau, Nicolas Berti, Sylvain Hermelin, Jérôme Kasparian, Maria Richter, Timm Bredtmann, Olga Smirnova, Jean-Pierre Wolf and Misha Ivanov - „Amplification of intense light fields by nearly free electrons“
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.165437>.

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Forschungsergebnisse

Ein Wimpernschlag vom Isolator zum Metall

Dank der geschickten Kombination neuartiger Technologien lassen sich vielversprechende Materialien für die Elektronik von morgen untersuchen.

In den letzten Jahrzehnten sind Computer immer schneller geworden und zugleich haben Festplatten und Speicherchips riesige Kapazitäten erreicht. Die Entwicklung kann aber nicht immer so weitergehen: Schon heute zeichnen sich physikalische Grenzen ab, die eine weitere drastische Beschleunigung der auf Silizium basierenden Computertechnik unmöglich machen. Bei der Suche nach neuartigen Materialien und Technologien für die Informationsverarbeitung versprechen sich Forscher insbesondere von der Kombination elektrischer und optischer Schaltkreise ganz neue Impulse. Mit Hilfe kurzer Laserpulse ist es nun einem Forscherteam um Misha Ivanov vom Max-Born-Institut in Berlin gemeinsam mit Wissenschaftlern des Russian Quantum Center bei Moskau gelungen, Licht auf die extrem schnellen Prozesse in solchen neuartigen Materialien zu werfen. Die Ergebnisse sind im renommierten Fachblatt „Nature Photonics“ erschienen.

Von besonderem Interesse für die moderne Materialforschung in der Festkörperphysik sind sogenannte „stark korrelierte Systeme“, bei denen sich die Elektronen im Material gegenseitig beeinflussen. Ein Beispiel hierfür sind Magnete: Hier richten sich die Elektronen im Material in einer bevorzugten Drehrichtung aus und erzeugen dadurch ein Magnetfeld. Es sind aber auch ganz andere Ordnungsstrukturen denkbar. Bei sogenannten Mott-Isolatoren, die derzeit intensiv erforscht werden, sollten die Elektronen eigentlich frei fließen können und das Material elektrisch leitend sein wie ein Metall. Aufgrund der gegenseitigen Wechselwirkungen in diesem stark korrelierten Material behindern sie sich aber gegenseitig und das Material wird zum Isolator.

Wenn man diese Ordnung durch einen starken Laserpuls stört, ändern sich auch die physikalischen Eigenschaften dramatisch. Man kennt dies vom Übergang von fest zu flüssig: Wenn Eis schmilzt, verwandelt sich der starre Eiskristall in frei bewegliche Wassermoleküle. Ganz ähnlich gewinnen auch die Elektronen in stark korrelierten Materialien Beweglichkeit, wenn ihre Ordnung durch externe Laserpulse einen Phasenübergang erfährt. Deshalb eröffnen solche Phasenübergänge die Möglichkeit, ganz neue Schaltelemente für die moderne Elektronik zu entwickeln, die schneller und vermutlich energieeffizienter als heutige Transistoren sind. Im Prinzip könnten Computer dank der Kombination von elektrischen Komponenten mit Lichtpulsen rund 1000-fach schneller werden.

Das Problem bei der Analyse solcher Phasenübergänge: Sie finden extrem schnell statt und lassen sich deshalb nur schwer untersuchen. Bislang konnten Wissenschaftler nur den Zustand

Research Highlights

From insulator to conductor in a flash

A clever combination of novel technologies enables us to study promising materials for the electronics of tomorrow.

Over the past decades, computers have become faster and faster and hard disks and storage chips have reached enormous capacities. But this trend cannot continue forever: we are already running up against physical limits that will prevent silicon-based computer technology from attaining any impressive speed gains from this point on. Researchers are particularly optimistic that the next era of technological advancements will start with the development of novel information-processing materials and technologies that combine electrical circuits with optical ones. Using short laser pulses, a research team led by Misha Ivanov of the Max Born Institute in Berlin together with scientists from the Russian Quantum Center in Moscow have now shed light on the extremely rapid processes taking place within these novel materials. Their results have appeared in the prestigious journal „Nature Photonics“.

Of particular interest for modern material research in solid state physics are „strongly correlated systems“, so called for the strong interactions between the electrons in these materials. Magnets are a good example of this: the electrons in magnets align themselves in a preferred direction of spin inside the material, and it is this that produces the magnetic field. But there are other, entirely different structural orders that deserve attention. In so-called Mott insulators for example, a class of materials now being intensively researched, the electrons ought to flow freely and the materials should therefore be able to conduct electricity as well as metals. But the mutual interaction between electrons in these strongly correlated materials impedes their flow and so the materials behave as insulators instead.

By disrupting this order with a strong laser pulse, the physical properties can be made to change dramatically. This can be likened to a phase transition from solid to liquid: as ice melts, for example, rigid ice crystals transform into free-flowing water molecules. Very similarly, the electrons in a strongly correlated material become free to flow when an external laser pulse forces a phase transition in their structural order. Such phase transitions should allow us to develop entirely new switching elements for next-generation electronics that are faster and potentially more energy efficient than present-day transistors. In theory, computers could be made around a thousand times faster by „turbo-charging“ their electrical components with light pulses.

The problem with studying these phase transitions is that they are extremely fast and it is therefore very difficult to „catch them in the act“. So far, scientists have had to content themselves with characterising the state of a material before and after a phase transition of this kind. Researchers Rui E. F. Silva, Olga

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

des Materials vor und nach einem solchen Phasenübergang bestimmen. Die Forscher Rui E.F. Silva, Olga Smirnova und Misha Ivanov haben nun aber eine Methode erdacht, im wahrsten Sinne des Wortes Licht auf diese Prozesse zu werfen: Laut ihrer Theorie kann man diese Materialien mit extrem kurzen, maßgeschneiderten Laserpulsen bestrahlen, die in dieser Qualität erst jetzt verfügbar sind. Damit lässt sich als Reaktion des Materials auf diese Pulse beobachten, wie die Elektronen im Material zu Bewegungen angeregt werden und dabei wie eine Glocke Oberschwingungen mit bestimmten Frequenzen aussenden, als Harmonische des einfallenden Lichts.

„Wenn wir dieses hohe harmonische Spektrum analysieren, können wir erstmals die Änderung der Ordnungsstruktur in diesen stark korrelierten Materialien ‚live‘ beobachten“, sagt Erstautor Rui Silva. Erst seit Kurzem gibt es Laserquellen, die überhaupt in der Lage sind, diese Übergänge gezielt auszulösen. Dazu müssen die Laserpulse einerseits stark genug sein - und andererseits extrem kurz und im Femtosekundenbereich liegen (millionstel milliardstel Sekunden).

Teilweise reicht eine einzige Lichtschwingung, um die Ordnung der Elektronen im Material durcheinanderzuwirbeln und aus einem Isolator einen metallartigen Leiter zu machen. Die Wissenschaftler am MBI gehören auf diesem Gebiet ultrakurzer Laserpulse zu den führenden Experten weltweit.

„Wenn wir die Eigenschaften der Elektronen im Material mit Licht kontrollieren wollen, müssen wir genau verstehen, wie die Elektronen auf Lichtpulse reagieren“, erklärt Ivanov. Dank der neuartigen Laserquellen, bei denen sich sogar einzelne Schwingungen des elektromagnetischen Feldes vollständig kontrollieren lassen, sind mit der nun publizierten Methode tiefe Einsichten in die Materialien der Zukunft möglich.

Kontakt: M. Ivanov, Tel. 1210, O. Smirnova, Tel. 1340, R.E.F. Silva, Tel.1239

Smirnova, and Misha Ivanov, however, have now devised a method that will, in the truest sense, shed light on the process. Their theory involves firing extremely short, tailored laser pulses at a material - pulses that can only recently be produced in the appropriate quality given the latest developments in lasers. One then observes the material's reaction to these pulses to see how the electrons in the material are excited into motion and, like a bell, emit resonant vibrations at specific frequencies, as harmonics of the incident light.

„By analysing this high harmonic spectrum, we can observe the change in the structural order in these strongly correlated materials ‚live‘ for the first time,“ says first author of the paper Rui Silva of the Max Born Institute. Laser sources capable of targetedly triggering these transitions have only been available since very recently. The laser pulses namely have to be amply strong and extremely short - on the order of femtoseconds in duration (millionths of a billionth of a second).

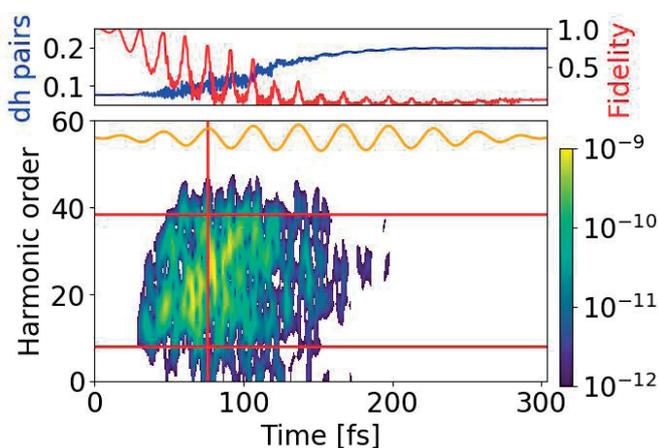
In some cases, it takes only a single oscillation of light to disrupt the electronic order of a material and turn an insulator into a metal-like conductor. The scientists at the MBI are among the world's leading experts in the field of ultrashort laser pulses.

„If we want to use light to control the properties of electrons in a material, then we need to know exactly how the electrons will react to light pulses,“ Ivanov explains. With the latest-generation laser sources, which allow full control over the electromagnetic field even down to a single oscillation, the newly published method will allow deep insights into the materials of the future.

Originalpublikation:

"High harmonic spectroscopy of ultrafast many-body dynamics in strongly correlated systems"

R. E. F. Silva, Igor V. Blinov, Alexey N. Rubtsov, O. Smirnova and M. Ivanov
Nature Photonics (2018) (online), DOI: 10.1038/s41566-018-0129-0
<https://www.nature.com/articles/s41566-018-0129-0>



Hochharmonische Spektroskopie des lichtinduzierten Phasenübergangs. Die vertikale rote Linie zeigt an, wenn das elektrische Feld des Lasers (gelbe Schwingkurve) das Schwellenfeld überschreitet und die Isolierphase des Materials zerstört. Die obere Platte zeigt die durchschnittliche Anzahl der Doppellochpaare pro Standort (blau) und den Zerfall des isolierenden feldfreien Grundzustandes (rot).

High harmonic spectroscopy of light-induced phase transition. The vertical red line shows when the laser electric field (yellow oscillating curve) crosses the threshold field, destroying the insulating phase of the material. The top panel shows the average number of doublon-hole pairs per site (blue) and the decay of the insulating field-free ground state (red).

Forschungsergebnisse

Schwingende Atome schalten die elektrische Polarisation von Kristallen

Ferroelektrische Kristalle besitzen eine makroskopische elektrische Polarisation, die durch die Überlagerung sehr vieler Dipole auf atomarer Skala hervorgerufen wird. Entscheidend ist dabei die räumliche Trennung von negativ geladenen Elektronen und positiv geladenen Atomkernen. Man erwartet eine Änderung der makroskopischen Polarisation, sobald die Atome in Bewegung versetzt werden, der Zusammenhang zwischen atomarer Bewegung und Polarisation ist jedoch unbekannt. Ein zeitaufgelöstes Röntgenexperiment zeigt jetzt, dass atomare Schwingungen mit einer winzigen Auslenkung Elektronen über eine 1000-fach größere Distanz zwischen Atomen verschieben und die makroskopische Polarisation auf einer Zeitskala von einem Millionstel einer Millionstel Sekunde umschalten.

Ferroelektrische Materialien sind von großer Bedeutung für Anwendungen in elektronischen Sensoren, Speichern und Schaltelementen. Für ihre Funktion ist eine kontrollierte und schnelle Veränderung der elektrischen Eigenschaften durch externe mechanische Kräfte oder elektrische Spannungen wichtig. Dies erfordert ein Verständnis des Zusammenhangs zwischen der atomaren Struktur und den makroskopischen elektrischen Eigenschaften, einschließlich der physikalischen Mechanismen, die eine schnellstmögliche Dynamik der makroskopischen Polarisation bestimmen.

Wissenschaftler des Max-Born-Instituts in Berlin haben jetzt gezeigt, wie atomare Schwingungen die makroskopische elektrische Polarisation des prototypischen Ferroelektrikums Ammoniumsulfat [Abb. 1] auf der Zeitskala weniger Pikosekunden modulieren (1 Pikosekunde (ps) = 1 Millionstel einer Millionstel Sekunde). In der neuesten Ausgabe der Zeitschrift *Structural Dynamics* [5, 024501 (2018)] berichten sie über ein Röntgenexperiment im Ultrakurzzeitbereich, das die quantitative Aufzeichnung von Ladungsbewegungen über Distanzen im Bereich von Atomdurchmessern erlaubt ($10^{-10} \text{ m} = 100 \text{ Pikometer}$). In den Messungen versetzt ein ultrakurzer optischer Anreizeimpuls Atome des Materials, eines aus kleinen Kristalliten bestehenden Pulvers, in Schwingung. Ein zeitlich verzögerter harter Röntgenimpuls wird an der angeregten Probe gebeugt um die momentane atomare Anordnung in Form eines Röntgenbeugungsmusters zu erfassen. Die Abfolge solcher Schnappschüsse ergibt einen Film der sog. Ladungsdichtekarte, aus der die räumliche Verteilung der Elektronen und die atomaren Bewegungen für jeden Zeitpunkt bestimmt werden. ([Abb. 2], [Movie]).

Die Elektronendichtekarten zeigen eine Elektronenbewegung über Längen von 100 Pikometern (pm), mehr als 1000-mal

Research Highlights

Wiggling atoms switch the electric polarization of crystals

Ferroelectric crystals display a macroscopic electric polarization, a superposition of many dipoles at the atomic scale which originate from spatially separated electrons and atomic nuclei. The macroscopic polarization is expected to change when the atoms are set in motion but the connection between polarization and atomic motions has remained unknown. A time-resolved x-ray experiment now elucidates that tiny atomic vibrations shift negative charges over a 1000 times larger distance between atoms and switch the macroscopic polarization on a time scale of a millionth of a millionth of a second.

Ferroelectric materials have received strong interest for applications in electronic sensors, memories, and switching devices. In this context, fast and controlled changes of their electric properties are essential for implementing specific functions efficiently. This calls for understanding the connection between atomic structure and macroscopic electric properties, including the physical mechanisms governing the fastest possible dynamics of macroscopic electric polarizations.

Researchers from the Max-Born-Institute in Berlin have now demonstrated how atomic vibrations modulate the macroscopic electric polarization of the prototype ferroelectric ammonium sulphate [Fig. 1] on a time scale of a few picoseconds (1 picosecond (ps) = 1 millionth of a millionth of a second). In the current issue of the journal *Structural Dynamics* [5, 024501 (2018)], they report an ultrafast x-ray experiment which allows for mapping the motion of charges over distances on the order of the diameter of an atom ($10^{-10} \text{ m} = 100 \text{ picometers}$) in a quantitative way. In the measurements, an ultrashort excitation pulse sets the atoms of the material, a powder of small crystallites, into vibration. A time-delayed hard x-ray pulse is diffracted from the excited sample and measures the momentary atomic arrangement in form of an x-ray powder diffraction pattern. The sequence of such snapshots represents a movie of the so-called electron-density map from which the spatial distribution of electrons and atomic vibrations are derived for each instant in time ([Fig. 2], [Movie]).

The electron density maps show that electrons move over distances of 10^{-10} m between atoms which are more than a thousand times larger than their displacements during the vibrations [Fig. 3]. This behavior is due to the complex interplay of local electric fields with the polarizable electron clouds around the atoms and determines the momentary electric dipole at the atomic scale. Applying a novel theoretical concept, the time-dependent charge distribution in the atomic world is linked to the macroscopic electric polarization [Fig. 3]. The latter is strongly modulated by the tiny atomic vibrations

größer als die Auslenkungen der Atome [Abb. 3]. Dieses Verhalten bestimmt die momentanen lokalen Dipole auf atomarer Skala [Abb. 1]. Es wird durch das komplexe Zusammenwirken lokaler elektrischer Felder und polarisierbarer Elektronenwolken der Atome verursacht. Mit einem neuartigen theoretischen Formalismus lässt sich nun aus den zeitabhängigen Ladungsverteilungen in der atomaren Welt die elektrische Polarisation in der makroskopischen Welt bestimmen [Abb. 3]. Die makroskopische Polarisation wird durch die atomaren Schwingungen stark moduliert und kehrt im Takt mit den Schwingungen sogar ihr Vorzeichen um. Die Modulationsfrequenz von 300 GHz ist durch die atomare Schwingungsfrequenz bestimmt und entspricht einer Richtungsumkehr der Polarisation innerhalb von 1.5 ps, viel schneller als in derzeit existierenden ferroelektrischen Bauelementen. An der Oberfläche eines Kristallits treten dabei elektrische Felder von ungefähr 700 Millionen Volt pro Meter auf.

Diese Ergebnisse etablieren die zeitaufgelöste Ultrakurzzeit-Röntgenbeugung als neue Methode für die Verknüpfung atomarer Dynamik mit makroskopischen elektrischen Eigenschaften. Damit können quantentheoretische Vorhersagen elektrischer Eigenschaften überprüft und neue polare oder ionische Materialien im Hinblick auf ihre Eignung für Höchstfrequenzelektronik charakterisiert werden.

and fully reverses its sign in time with the atomic motions. The modulation frequency of 300 GHz is set by the frequency of the atomic vibrations and corresponds to a full reversal of the microscopic polarization within 1.5 ps, much faster than any existing ferroelectric switching device. At the surface of a crystallite, the maximum electric polarization generates an electric field of approximately 700 million volts per meter.

The results establish time-resolved ultrafast x-ray diffraction as a method for linking atomic-scale charge dynamics to macroscopic electric properties. This novel strategy allows for testing quantum-mechanical calculations of electric properties and for characterizing a large class of polar and/or ionic materials in view of their potential for high-speed electronics

Original article:

Christoph Hauf, Antonio-Andres Hernandez Salvador, Marcel Holtz, Michael Woerner, and Thomas Elsaesser
„Soft-mode driven polarity reversal in ferroelectrics mapped by ultrafast x-ray diffraction“ *Struct. Dyn.* 5, 024501 (2018).

<https://aca.scitation.org/doi/10.1063/1.5026494>

Contact:

M. Woerner, Tel. 1470, C. Hauf, Tel.1473, T. Elsaesser, Tel.1400

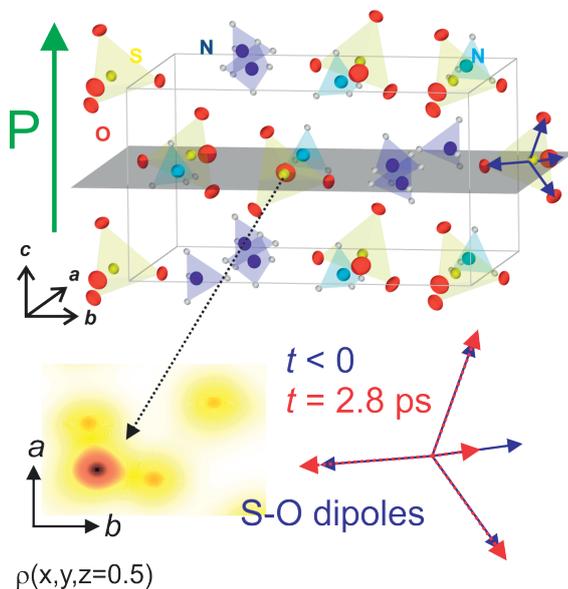


Fig. 1: Crystal lattice of ferroelectric ammonium sulfate $[(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4]$ with tilted ammonium (NH_4^+) tetrahedra (nitrogen: blue, hydrogen: white) and sulfate (SO_4^{2-}) tetrahedra (sulfur: yellow, oxygen: red). The green arrow shows the direction of macroscopic polarization P . Blue arrows: local dipoles between sulphur and oxygen atoms. The electron density maps shown in the bottom left panel, in Fig. 2, and the movie are taken in the plane shown in grey. Bottom left: Stationary electron density of sulfur and oxygen atoms, displaying high values on the sulfur (red) and smaller values on the oxygens (yellow). Bottom right: Change of local dipoles at a delay time of 2.8 picoseconds (ps) after excitation of the ammonium sulfate crystallites. An anisotropic shift of charge reduces the dipole pointing to the right and increases the other 3 dipoles.

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

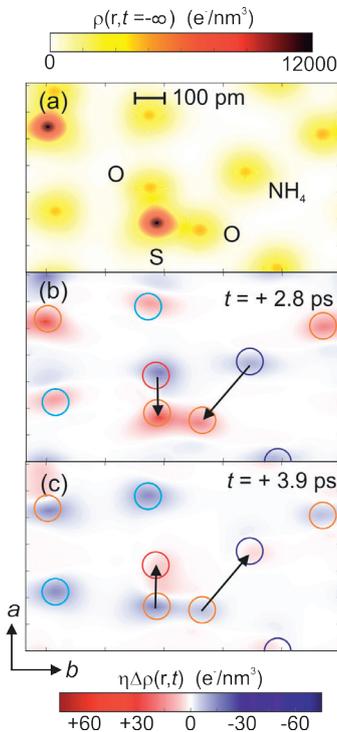
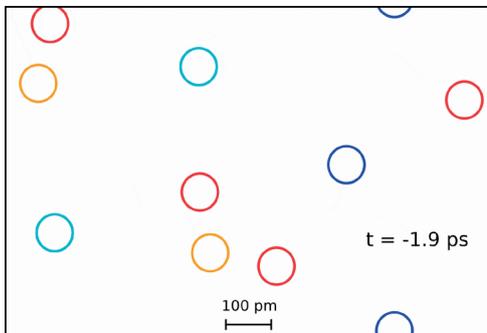


Abb. 2: (a) Stationäre Elektronendichte in der grauen Ebene in Abb. 1. (b) Änderung der Elektronendichte bei einer Verzögerungszeit von 2.8 Pikosekunden (ps) nach Anregung der Ammoniumsulfat-Kristallite. Die Kreise markieren die Atompositionen, die schwarzen Pfeile kennzeichnen die Verschiebung elektronischer Ladung zwischen einem der Sauerstoffatome und der SO_3 -Einheit eines Sulfations über eine Länge von ca. 100 Pikometern (pm). Die Schwingungsauslenkungen der Atome sind kleiner als die Strichstärke der Kreise und deshalb nicht erkennbar. (c) Der Rücktransfer der Ladung geschieht bei einer Verzögerungszeit von 3.9 ps.

Fig 2: (a) Stationary electron density in the grey plane shown in Fig. 1. (b) Change of electron density at a delay time of 2.8 picoseconds (ps) after excitation of the ammonium sulfate crystallites. The circles mark the atomic positions, the black arrows indicate the transfer of electronic charge between one of the oxygen atom and the SO_3 group of a single sulfate ion. The vibrational displacements of the atoms are smaller than the line thickness of the circles and, thus, invisible on this length scale. (c) The reverse charge transfer occurs at a delay time of 3.9 ps.



Movie: Der Film zeigt die gesamte zeitliche Entwicklung der Ladungsdichtekarte.
 Movie: The movie shows the entire temporal evolution of the electron density map.

http://www.mbi-berlin.de/en/current/index.html#2018_04_12

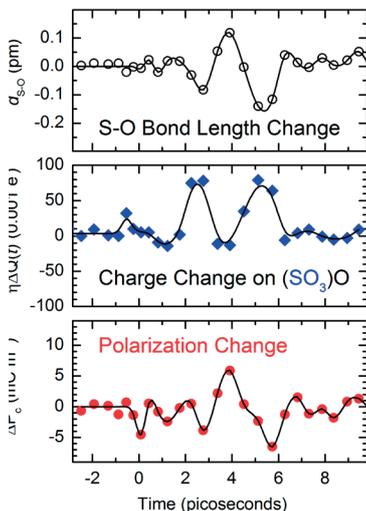


Abb. 3: Oberes Teilbild: Änderung der S-O Bindungslänge als Funktion der Verzögerungszeit zwischen Anregungs- und Röntgenimpuls. Die maximale Änderung von 0.1 Pikometern (pm) ist 1000-mal kleiner als die Bindungslänge selbst. Mittleres Teilbild: Verschiebung elektronischer Ladung von einem der Sauerstoffatome auf die SO_3 -Einheit des Sulfations (linke Pfeile in Abb. 2) als Funktion der Verzögerungszeit. Unteres Teilbild: Änderung der makroskopischen Polarisation P entlang der c -Achse des Kristallits. Dies entspricht überwiegend der Summe der Änderungen aller lokalen S-O Dipole innerhalb der Sulfationen (rote und blaue Pfeile in Abb. 1 unten rechts).

Fig 3: Upper panel: Change of the S-O bond length as a function of the delay time. The maximum change of 0.1 pm is 1000 times smaller than the bond length itself, i.e., the atomic motions cannot be observed in Fig. 2. Middle panel: Charge transfer from one oxygen atom to the SO_3 group of the sulfate ion (left black arrows in Fig. 2) as a function of delay time. Lower panel: Change of the macroscopic polarization P along the c axis which is the sum of all microscopic dipole changes of the local S-O dipoles within the sulfate ions (red and blue arrows in Fig. 1 bottom right).

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Forschungsergebnisse

Ein Kreisel aus Licht

Kurze, rotierende Lichtpulse verraten viel über die innere Struktur von Materialien. Ein internationales Team von Physikern um Misha Ivanov hat nun ein neues Verfahren entwickelt, um solche extrem kurzen Lichtpulse genau zu charakterisieren. Die Forschungsergebnisse sind in Nature Communications erschienen.

Licht ist nicht gleich Licht: Je nach Art der Präparation kann es in ganz verschiedener Weise vorliegen. Nicht nur seine Wellenlänge oder Farbe lässt sich wählen. Als elektromagnetische Welle kann Licht auch verschiedene Schwingungsarten aufweisen. So kann es etwa in unterschiedlicher Polarisation auftreten - entweder linear polarisiert mit geradliniger oder zirkular polarisiert mit kreisförmiger Schwingung der elektromagnetischen Felder. Vor allem extrem kurze Pulse zirkular polarisierter Lichtwellen eignen sich hervorragend, um ganz unterschiedliche Materialien zu untersuchen. Mit heutigen Methoden lassen sich solche Pulse zwar herstellen. Noch sind die Methoden aber an der Grenze des technisch Machbaren und die produzierten Lichtpulse zeigen nicht immer die erwünschten Eigenschaften.

Ein neues Verfahren ermöglicht es nun, solche Lichtpulse mit ungeahnter Präzision zu charakterisieren. Die besondere Schwierigkeit dabei: Die interessanten Prozesse in Materie, die man durch Bestrahlung mit Lichtpulsen untersuchen will, sind außerordentlich kurz. Dementsprechend kurz, im Bereich von rund 100 Attosekunden (milliardstel milliardstel Sekunden), müssen auch die Lichtpulse sein. In diesem winzigen Zeitraum vollführt eine Lichtwelle nur wenige Drehungen. Wenn man solche ultrakurzen Pulse mit neuartigen Laserverfahren herstellt, kann es schnell passieren, dass die Lichtwellen nicht richtig rotieren.

Die Idee hinter dem neuen Verfahren: Man bestrahlt ein Atom oder einen Körper mit einem extrem kurzen, hochenergetischen und zirkular polarisierten Lichtpuls, wobei dieser Puls absorbiert wird und ein Elektron aus dem Körper heraus schlägt. Dieses Elektron trägt dann einerseits Informationen über die Lichtwelle in sich und kann andererseits Aufschluss über die Eigenschaften des untersuchten Körpers geben. Da die Lichtpulse zirkular polarisiert sind, vollführen auch die herausgeschlagenen Elektronen Drehungen.

„Man kann die herausgeschlagenen Elektronen mit einem einarmigen Sprinkler vergleichen, der sich entweder dreht wie gewünscht oder immer wieder ins Stottern kommt und sogar seine Drehrichtung ändert“, sagt Misha Ivanov, Leiter der Theorie-Abteilung. Wenn der Sprinkler nun eine Weile läuft, macht

Research Highlights

A spinning top of light

Short, rotating pulses of light reveal a great deal about the inner structure of materials. An international team of physicists led by Misha Ivanov) has now developed a new method for precisely characterising such extremely short light pulses. The research results have been published in Nature Communications

Not all light is equal: depending on how it is prepared, it can exist in very different forms. Not only can we choose different wavelengths or colours but, as an electromagnetic wave, light can also exhibit different forms of oscillation. It can occur in different polarisations, for example - either linearly polarised or circularly polarised, where the oscillations of the electromagnetic fields follow a line or go round in circles, respectively. Above all, extremely short pulses of polarised light waves are excellent for studying many different types of materials. We have methods for producing such pulses, but these methods are already pushing the limits of technical feasibility and the light pulses are not always produced with the desired properties.

A new method now allows us to characterise these short light pulses with unprecedented precision. The trouble starts with the fact that the processes of interest taking place inside matter, which we would like to study with our light pulses, are extremely short-lived. Accordingly, the light pulses have to be similarly short, in the range of around 100 attoseconds (billionths of a billionth of a second). In this unimaginably short timespan, a light wave can only undergo a few rotations. Even using the latest laser methods to produce such ultrashort pulses, it can easily happen that the light wave will not come out rotating the right way.

The concept for the new method can be described as follows: one fires an extremely short, high-energy and circularly polarised light pulse at an atom or a solid body where, upon being absorbed, the light pulse knocks an electron out of the body. This electron then carries information about the light wave itself and can furthermore reveal clues as to the properties of the sample being examined. Because the light pulses are circularly polarised, the ejected electrons also fly off with a rotating motion.

„You can compare the electrons being ejected with a one-armed sprinkler, which either continues turning in the direction you want it to, or which keeps stuttering and even changing its direction,“ says Misha Ivanov, Head of the Theory Department. If the sprinkler is allowed to run for a while, then it will wet the grass in a full circle - irrespective of whether it rotates consistently or not. So, merely looking at the grass will not reveal whether the sprinkler has been turning exactly the way it

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

er den Rasen um ihn kreisförmig nass - unabhängig davon, ob er gleichmäßig rotiert oder nicht. Um herauszufinden, ob sich der Sprinkler exakt in die gewünschte Richtung dreht, reicht es also nicht aus, einfach den Rasen zu betrachten. „Wenn aber zusätzlich ein böiger Wind weht, können wir unterscheiden, ob sich der Sprinkler gleichmäßig oder unregelmäßig dreht“, so Ivanov. Wenn etwa jedes Mal abwechselnd ein Windstoß von links oder rechts erfolgt, wenn sich der Arm des Sprinklers links oder rechts befindet, dann wird der Rasen nicht kreisförmig nass, sondern eine diagonale Ellipse aufweisen. Ein völlig irregulär rotierender Sprinkler würde eine in die Windrichtung ausgerichtete Ellipse auf den Rasen zaubern, während ein regulär rotierender Sprinkler eine schiefe Ellipse zeigen würde.

Als „Wind“ dient dabei ein Infrarot-Laserpuls, dessen Schwingungen genau mit den ultrakurzen Pulsen synchronisiert sind. Die Infrarot-Strahlung beschleunigt das Elektron entweder nach links oder rechts - genau wie der Wind die Wassertropfen.

„Mit einer Messung an den Elektronen können wir dann nachweisen, ob der Lichtpuls die gewünschte gleichmäßige Rotation besessen hat oder nicht“, sagt Álvaro Jiménez-Galán, Wissenschaftler am MBI und Erstautor der Veröffentlichung in „Nature Communications“. „Mit unserer Methode ist es möglich, die Eigenschaften der ultrakurzen Lichtpulse mit bislang nicht erreichter Präzision zu ermitteln“, so Jiménez-Galán. Und wenn die Lichtpulse erst einmal scharf bestimmt sind, lässt sich umso genauer die Information des Elektrons über seinen Herkunftsort im Innern exotischer Materialien herauslesen.

Das ist insbesondere zur Untersuchung an einer ganzen Reihe neuartiger Materialien von Bedeutung. Dazu könnten einerseits Supraleiter zählen, die Strom ohne elektrischen Widerstand leiten können, und andererseits topologische Materialien, die exotische Eigenschaften aufweisen und für deren Erforschung der Physik-Nobelpreis 2016 vergeben wurde. Diese Materialien könnten in einem Quantencomputer zum Einsatz kommen oder besonders schnelle und energieeffiziente Prozessoren und Speicherchips in normalen Computern und Smartphones möglich machen.

Das neue Sprinkler-Verfahren existiert zwar vorerst noch nur in der Theorie, sollte sich aber schon in naher Zukunft umsetzen lassen. „Unsere Vorgaben entsprechen dem heutigen Stand der Technik, deshalb steht einer baldigen Realisierung im Labor nichts entgegen“, meint Ivanov.

Kontakt:

M. Ivanov, Tel.1210, Á. Jiménez-Galán, Tel.1340, O. Smirnova, Tel.1340

was desired or not. „But if a gusty wind comes along, then we can distinguish whether the sprinkler has been turning regularly or irregularly,“ Ivanov says. If the wind blows alternately from the left or right each time the arm of the sprinkler faces left or right, then the patch of wet grass will not be circular, but rather elliptical in shape. A sprinkler rotating completely irregularly would magically conjure up an ellipse on the grass stretched in the wind direction, while a regularly rotating sprinkler will display a tilted ellipse.

This „wind“ is added into the experiment in the form of an infrared laser pulse whose oscillations are perfectly synchronised with the ultrashort pulses. The infrared radiation accelerates the electron either to the left or right - just like the wind blows the water droplets.

„By measuring the electrons, we can then determine whether the light pulse possessed the desired consistent rotation or not,“ says the first author of the publication in „Nature Communications“, researcher Álvaro Jiménez-Galán of the MBI. „Our method allows one to characterise the properties of the ultrashort light pulses with unprecedented precision,“ Jiménez-Galán adds. And the more precisely these light pulses are characterised, the more detailed information can be derived about the electron’s place of origin within an exotic material.

This is of special significance when it comes to studying a whole series of novel materials. These could include superconductors, which can conduct electricity without electrical resistance, or topological materials that exhibit exotic behaviour, the research of which earned a Nobel Prize in Physics in 2016. Materials like these could be used to make a quantum computer, for example, or could allow superfast, energy-efficient processors and memory chips to be built into normal computers and smartphones.

The new sprinkler method still only exists in theory for the moment, but ought to be implementable in the near future. „Our requirements are fully within the latest state of the art, so there is nothing to preclude this from being realised soon,“ Ivanov asserts.

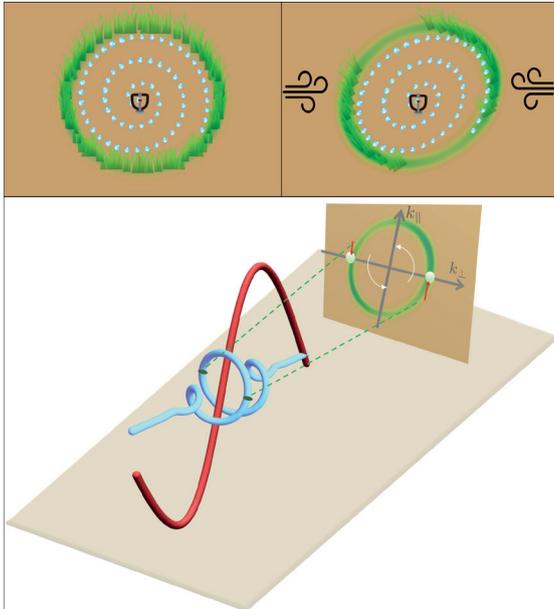
Original Publication:

Álvaro Jiménez-Galán, Gopal Dixit, Serguei Patchkovskii, Olga Smirnova, Felipe Morales & Misha Ivanov: Attosecond recorder of the polarization state of light Nature Communications, Volume 9, Article No.850 (2018), doi:10.1038/s41467-018-03167-2

<https://www.nature.com/articles/s41467-018-03167-2>

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018



Ein in Ruhe arbeitender Sprinkler verteilt das Wasser gleichmäßig im Kreis und das Gras wächst in einem kreisförmigen Muster - unabhängig davon, ob sich der Sprinkler im Uhrzeigersinn, gegen den Uhrzeigersinn oder zufällig dreht. Wenn Wind weht, wird das Gras ungleichmäßig nass - dies zeigt sich auch in seinem Wachstum. Wenn der Wind seine Richtung aber synchron zur Drehung des Sprinklers wechselt, führt dies zu einer Asymmetrie im Graswachstum. Diese erlaubt es, die Dreieigenschaft des Sprinklers zu rekonstruieren - ob es sich also um einen präzisen, regelmäßig rotierenden Sprinkler handelt oder um ein billiges Exemplar, das zufällig rotiert.

In der Untersuchung ist der Sprinkler der kurze Puls (blau), der nur rund 10^{-16} Sekunden dauert und dessen elektrisches Feld sogar noch schneller rotiert. Als "Wind" dient ein linear polarisiertes und präzise kontrolliertes Infrarot-Laserfeld (rot). Das Gras ist die gemessene Photoelektronen-Winkelverteilung (grün). Die Asymmetrie im Letzteren erlaubt erstmalig, die Eigenschaften der ultrakurzen Pulse zu rekonstruieren. (Quelle: Felipe Morales und Álvaro Jiménez-Galán)

Left alone, the circular sprinkler distributes the water evenly, and the grass grows in a circular pattern regardless of whether the sprinkler rotates clock-wise, counter-clockwise, or randomly. If wind blows, the grass is watered unevenly, as seen in its growth. If the wind blows in a regular pattern, changing its strength with clock-work precision, the asymmetry in the grass growth allows us to reconstruct the properties of the sprinkler, distinguishing the precision-made, regularly rotating sprinkler from a randomly oscillating cheap version.

In our micro-world setup, the sprinkler is the short pulse (in blue), lasting only about 10^{-16} sec, with its electric field rotating even faster in an unknown pattern. The wind is a linearly polarized and precisely controlled infrared laser field (in red). The grass is the measured photoelectron angular distribution (in green). The asymmetry in the latter allows us to reconstruct, for the first time, the polarization properties of the ultra-short pulse that lasts about 10^{-16} sec. (Figure credit: Felipe Morales und Álvaro Jiménez-Galán)

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Forschungsergebnisse

Wenn Elektronen Walzer tanzen - Rechts- und linkshändige Moleküle lassen sich mit Hilfe kurzer Laserpulse auseinanderhalten

Die Identifikation rechts- und linkshändiger Moleküle ist entscheidend für viele Anwendungen in der Chemie und Pharmazie. Ein internationales Forscherteam (CELIA-CNRS/INRS/MBI/SOLEIL) hat nun ein neues originelles und hochempfindliches Verfahren vorgestellt, mit dem sich die Händigkeit von Molekülen um ein Vielfaches besser bestimmen lässt als mit bisherigen Methoden. Mit Hilfe extrem kurzer Laserpulse bringen die Forscher Elektronen in Molekülen zum Schwingen und können so den Drehsinn der Moleküle bestimmen. Die Forschungsergebnisse sind in „Nature Physics“ erschienen.

Nicht nur beim Menschen ist die Frage wichtig, ob jemand Rechts- oder Linkshänder ist. Je nachdem, mit welcher Hand wir etwas greifen, umschließen unsere Finger ein Objekt im Uhrzeigersinn oder gegen ihn. Auch in der Welt der Moleküle ist die Händigkeit von großer Bedeutung. Bei Molekülen ist die Eigenschaft, eine bevorzugte Händigkeit zu haben, sogar noch viel wichtiger als beim Menschen: Denn bestimmte Substanzen können je nachdem, ob sie rechts- oder linkshändig vorliegen, entweder giftig oder heilsam sein. Manche Medikamente dürfen deshalb nur entweder links- oder rechtshändige Moleküle enthalten.

Das Problem dabei liegt darin, rechts- und linkshändige Moleküle, die sonst völlig identisch sind, nach ihrem „Chiralität“ genannten Drehsinn zu identifizieren und zu trennen. Denn außer bei Kontakt mit einem anderen chiralen Stoff verhalten sie sich völlig gleich. Ein internationales Forscherteam hat nun ein neues Verfahren entwickelt, mit dem sich die Händigkeit von Molekülen mit extremer Empfindlichkeit bestimmen lässt.

Seit dem 19. Jahrhundert ist bekannt, dass Moleküle in unterschiedlicher Händigkeit vorliegen können. Bekanntestes Beispiel ist das Erbgut, wie etwa menschliche DNA, dessen Struktur einem rechtsdrehenden Korkenzieher entspricht. Zur Bestimmung der Händigkeit nutzt man üblicherweise sogenannte zirkular polarisierte Lichtstrahlen, die entweder rechts- oder linksdrehende elektromagnetische Felder aufweisen - wie ein Korkenzieher entlang der Ausbreitungsachse gewickelt. Dieses chirale Licht wird etwas besser oder schlechter absorbiert, wenn es auf Moleküle mit gleichem oder umgekehrtem Drehsinn trifft. Der Effekt ist jedoch klein, da die Wellenlänge von Licht sehr viel größer ist als die atomaren Abstände in Molekülen. Das Licht „spürt“ den Drehsinn der Moleküle also nur ganz schwach.

Research Highlights

C'mon electrons, let's do the twist! Twisting electrons can tell right-handed and left-handed molecules apart.

Identifying right-handed and left-handed molecules is a crucial step for many applications in chemistry and pharmaceuticals. An international research team (CELIA-CNRS/INRS/Born Institute/SOLEIL) has now presented a new original and very sensitive method. The researchers use laser pulses of extremely short duration to excite electrons in molecules into twisting motion, the direction of which reveals the molecules' handedness. The research results appear in Nature Physics.

Identifying right-handed and left-handed molecules is a crucial step for many applications in chemistry and pharmaceuticals. An international research team (CELIA-CNRS/INRS/MBI/SOLEIL) has now presented a new original and very sensitive method. The researchers use laser pulses of extremely short duration to excite electrons in molecules into twisting motion, the direction of which reveals the molecules' handedness. The research results appear in Nature Physics.

Are you right handed or left handed? No, we aren't asking you, dear reader; we are asking your molecules. It goes without saying that, depending on which hand you use, your fingers will wrap either one way or the other around an object when you grip it. It so happens that this handedness, or „chirality“, is also very important in the world of molecules. In fact, we can argue that a molecule's handedness is far more important than yours: some substances will be either toxic or beneficial depending on which „mirror-twin“ is present. Certain medicines must therefore contain exclusively the right-handed or the left-handed twin.

The problem lies in identifying and separating right-handed from left-handed molecules, which behave exactly the same unless they interact with another chiral object. An international research team has now presented a new method that is extremely sensitive at determining the chirality of molecules.

We have known that molecules can be chiral since the 19th century. Perhaps the most famous example is DNA, whose structure resembles a right-handed corkscrew. Conventionally, chirality is determined using so-called circularly polarised light, whose electromagnetic fields rotate either clockwise or anticlockwise, forming a right or left „corkscrew“, with the axis along the direction of the light ray. This chiral light is absorbed differently by molecules of opposite handedness. This effect, however, is small because the wavelength of light is much longer than the size of a molecule: the light's corkscrew is too big to sense the molecule's chiral structure efficiently.

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Mit der neuen Methode lässt sich das Signal aber enorm verstärken. „Der Trick besteht darin, die Moleküle mit einem sehr kurzen Laserpuls zu bestrahlen“, sagt Prof. Olga Smirnova, Leiterin der Theoriegruppe am Max-Born-Institut. Solch ein Puls ist nur rund eine zehntel billionstel Sekunde lang und überträgt Energie auf die Elektronen im Molekül. Das regt sie für kurze Zeit zu Schwingungen an. Da sich die Elektronen in der rechts- oder linkshändigen Struktur des Moleküls befinden, nimmt auch ihre Schwingung diesen Drehsinn an.

Die Schwingung lässt sich dann mit einem zweiten Laserpuls auslesen. Dieser Puls muss ebenfalls kurz sein, um die Richtung der Elektronenbewegung registrieren zu können. Er hat so viel Energie, dass er die angeregten Elektronen aus dem Molekül herausschlägt. Je nachdem, ob die Elektronen rechts- oder linkshändig orientierte Schwingungen vollführten, fliegen sie dann entweder in Richtung des Laserstrahls aus dem Molekül oder in umgekehrter Richtung.

Bei Experimenten am „Centre for Intense Lasers and Applications“ CELIA) der Universität Bordeaux konnte auf diese Weise sehr effizient die Händigkeit der Moleküle bestimmt werden, und zwar mit einem 10.000-fach stärkeren Signal als mit der üblicherweise genutzten Methode. Außerdem lassen sich so chirale chemische Reaktionen einleiten und über die Zeit verfolgen. Das Kunststück besteht darin, sehr kurze Laserpulse mit der passenden Frequenz bereitzustellen. Diese Technologie stammt aus der physikalischen Grundlagenforschung und ist erst seit Kurzem verfügbar. Sie könnte sich für andere Bereiche als äußerst hilfreich erweisen, bei denen die Händigkeit von Molekülen eine Rolle spielt, etwa für die chemische und pharmazeutische Forschung.

Da die Identifikation der Händigkeit von Molekülen mit der neuen Methode gelungen ist, denken die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler bereits darüber nach, auch ein Laser-Trennverfahren für rechts- und linkshändige Moleküle zu entwickeln. (Text: Dirk Eidemüller)

The new method, however, greatly amplifies the chiral signal. „The trick is to fire a very short, circularly polarized laser pulse at the molecules,“ says Olga Smirnova from the Max Born Institute. This pulse is only some tenths of a trillionth of a second long and transfers energy to the electrons in the molecule, exciting them into helical motion. The electrons’ motion naturally follows a right or left helix in time depending on the handedness of the molecular structure they reside in.

Their motion can now be probed by a second laser pulse. This pulse also has to be short to catch the direction of electron motion and have enough photon energy to knock the excited electrons out of the molecule. Depending on whether they were moving clockwise or anticlockwise, the electrons will fly out of the molecule along or opposite to the direction of the laser ray.

This lets the experimentalists of CELIA to determine the chirality of the molecules very efficiently, with a signal 1000 times stronger than with the most commonly used method. What’s more, it could allow one to initiate chiral chemical reactions and follow them in time. It comes down to applying very short laser pulses with just the right carrier frequency. The technology is a culmination of basic research in physics and has only been available since recently. It could prove extremely useful in other fields where chirality plays an important role, such as chemical and pharmaceutical research.

Having succeeded in identifying the chirality of molecules with their new method, the researchers are now thinking already of developing a method for laser separation of right- and left-handed molecules. Text: D. Eidemueller - Translation: P. Gregg

Contact: O. Smirnova, Tel.: 1340

Originalpublikation: Nature Physics

S. Beaulieu, A. Comby, D. Descamps, B. Fabre, G. A. Garcia, R. Géneaux, A. G. Harvey, F. Légaré, Z. Mašin, L. Nahon, A. F. Ordóñez, S. Petit, B. Pons, Y. Mairesse, O. Smirnova and V. Blanchet: Photoexcitation Circular Dichroism in Chiral Molecules - Nature Physics (2018) online, doi:10.1038/s41567-017-0038-z.

<https://www.nature.com/articles/s41567-017-0038-z>

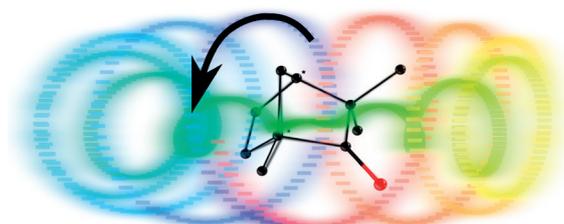


Abb. 1: Durch einen ultrakurzen, zirkular polarisierten Laserpuls folgen die Elektronen einer spiralförmigen Rechts- oder Linksdrehung, die von der Händigkeit der Moleküle abhängt. Quelle: Samuel Beaulieu

Fig. 1: Following excitation by an ultra-short circularly polarised laser pulse, electrons follow a right or left helix depending on the handedness of the molecular structure they reside in. Source: Samuel Beaulieu

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Auch in diesem Jahr fand der Girls' Day im Max-Born-Institut statt



Dieser Tag sollte dazu dienen, bei jungen Mädchen das Interesse an technischen oder naturwissenschaftlichen Berufen zu wecken und ihnen Mut zu machen, sich für solche Berufe zu entscheiden.

Am 26. April nahmen 20 Mädchen im Alter von 11-15 Jahren ihre Chance im MBI wahr. Über diese zahlreiche Teilnahme freuten wir uns wieder sehr.

Danke an alle Kollegen und Kolleginnen, die diesen Tag vorbereitet und mitgestaltet haben, an den Stationen tätig oder als Gruppenführer mit den Schülerinnen unterwegs waren.

Weitere Bilder und Informationen kann man hier finden:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_girlsday/ge_girlsday.html

In vier Gruppen eingeteilt konnten z.T. Experimente selbst durchgeführt und in der Werkstatt ein Armband als Erinnerung hergestellt werden. In diesem Jahr waren zwei Stationen mit neuen Themen zu besuchen, die auf großes Interesse stießen. Die Versorgung mit gesunden Nahrungsmitteln fand auch diese Mal große Zustimmung. Als Erinnerung bekamen alle Schülerinnen Erinnerungsgeschenke mit, die teilweise von WISTA bereitgestellt wurden. Das Feedback der Schülerinnen war sehr positiv und darüber haben sich auch alle beteiligten Kollegen und Kolleginnen gefreut. Nach einer kurzweiligen Einführung durch M. Richter und einer notwendigen Arbeitsschutzbelehrung durch A. Grimm konnten sich die Mädchen bei den sehr unterschiedlichen Stationen einen Einblick in die Arbeit eines Forschungsinstitutes machen.

Die diesjährigen Stationen des Girlsday's: / This year's Girl's Day stations:

Quantenphysik (M. Richter)

Nach einem kurzen Vortrag erfuhren die Schülerinnen durch selbstständiges Arbeiten am Computer, wie quantenmechanische Vorgänge in der Natur am Computer simuliert werden können, insbesondere wie Quantenteilchen durch Hindernisse tunneln können, die für klassische Teilchen unüberwindbar sind.

Quantum physics (M. Richter)

After a short introduction, the schoolgirls worked independently at computer stations to explore how quantum mechanical processes in nature can be simulated at the computer, in particular, how quantum particles can tunnel through barriers that are insurmountable for classical particles.

Flüssiger Stickstoff – ein Hilfsmittel für die Forschung / Laborführung

(F. Willems, D. Weder, C. von Korff Schmising)

Es wurde erklärt, wie Stickstoff in der Forschung eingesetzt wird und dabei verschiedene Experimente durchgeführt.



Liquid nitrogen – an essential material in research / laboratory management (F. Willems, D. Weder, C. von Korff Schmising)

It was explained, how liquid nitrogen is used in research and different experiments were carried out.

Also this year the Girl's Day took place at the Max Born Institute

The Girl's Day aims at increasing girls interest in technical and scientific education and encouraging them to also choose such career paths.

On April 26th, 20 girls between the ages of 11 and 15 years took their chance attending the Girl's Day at MBI. We were happy about the numerous participation.

Many thanks to everyone who helped and contributed to making this day again a fabulous success at either of the four stations or accompanying the girls.

For more impressions please consult the site:

http://intern.mbi-berlin.de/de/gender_equality/ge_girlsday/ge_girlsday.html

Divided into four groups the girls could make real experiments, such as manufacturing a bracelet in the mechanic's workshop. Two stations with new themes were built up this time, and were met with great interest. The served fresh and healthy meal at lunch was highly esteemed. The give-aways were partly sponsored by Wista and had been well received. The organizers and helpers were utmost pleased about the positive feedback given by all the girls. After a captivating introduction of M. Richter and a necessary lecture about health and safety regulations of A. Grimm the young visitors had the opportunity to gain a practical insight into the working life of our institute.



MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Werkstatt- Spezialisten unterstützen die Wissenschaft - Eine kleine Überraschung zum Mitnehmen aus eigener Hand

(M. Poppe & T. Müller)

In der Werkstatt konnten sich die Mädchen selber ein kleines Andenken herstellen und mit nach Hause nehmen. Die Schülerinnen waren begeistert und voller Aufmerksamkeit bei der Erklärung, was zu tun ist, um solch ein Werkstück „Armband“ herzustellen.



Workshop specialists support science research - A small surprise homemade to take as souvenir (M. Poppe & T. Müller)

As every year the girls had the chance to create their own personal piece of jewellery. With enthusiasm they followed the manufacturing instructions for the bracelet.

Rasterelektronenmikroskopie - Eine kurze Reise in die Nanowelt!

(D. Engel)

Bekannte Objekte mit Strukturgrößen im Mikrometer- und Nanometerbereich wurden mit Hilfe von Elektronen sichtbar gemacht. Es ergaben sich ungewohnte Ansichten von Details, die mit dem bloßen Auge nicht zu erfassen sind.

Scanning electron microscopy - A short trip into the nanoworld!

(D. Engel)

Everyday objects with structure sizes in the micrometer and nanometer range were visualized by the help of electrons resulting in unfamiliar views on details, that are not visible by the naked eye.



In der Mittagspause gab es neben dem Mittagsbuffet auch eine besondere Vorführung: die Kombination von Stickstoff und leckeren Nachtisch. Dazu wurde eine kurze Einführung von Herrn Willems gegeben. Die Schülerinnen konnten sehen, wie Stickstoff bei der Herstellung von Eis genutzt werden kann und waren hellauf begeistert, auch noch ihre Geschmacksrichtung (Banane, Melone, Orange, Erdbeere) selber auswählen zu können.



During lunch break the girls were surprised with a particular dessert by using liquid nitrogen. Felix Willems revealed the „secret“: The schoolgirls were thrilled to observe the different stage of making icecreme by using liquid nitrogen and on the top to choose their favourite flavours.

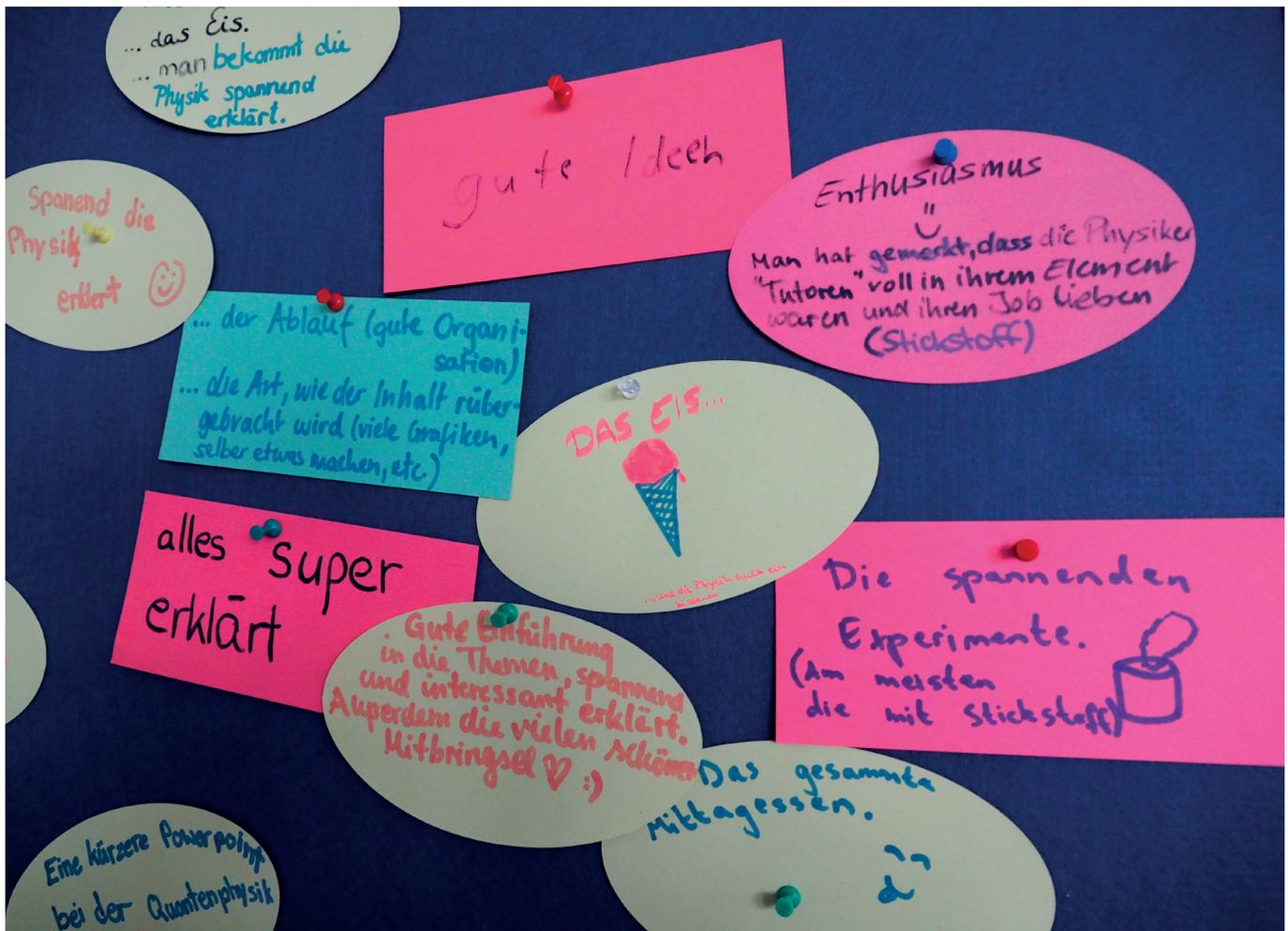
Wie man sehen kann, hatten alle viel Spaß dabei.

We could see that all girls had at least as much fun as we did while preparing this day.

Kontakt: M. Rink, Tel. 1551

MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018



MBI Interner Newsletter

9. Jahrgang - Ausgabe 30 - Mai 2018

Termine - Save the date

Samstag, 9. Juni 2018

Lange Nacht der Wissenschaften

Mittwoch/Donnerstag, 29. und 30. August 2018

MBI Symposium / The Annual Symposium MBI

Donnerstag & Freitag, 20. und 21. September 2018

Wissenschaftlicher Beirat /

Scientific Advisory Board at Max Born Hall

Donnerstag & Freitag, 16. und 17. Mai 2019

Evaluierung / Evaluation

Donnerstag, 13. Juni 2019

Sommerfest FvB 2019 in der Kulturbrauerei

Freitag, 22. Juni 2018

Daniela Rupp wird den Karl-Scheel Preis 2018 erhalten

Daniela Rupp will receive the Karl Scheel Prize 2018

Wie die Physikalische Gesellschaft zu Berlin bekannt gab, wird Frau Dr. Daniela Rupp, Nachwuchsgruppenleiterin am Max-Born-Institut, mit dem Karl-Scheel Preis geehrt werden. Die Preisverleihung findet am **Freitag, 22. Juni 2018 um 17:00 Uhr im Magnus-Haus** in Berlin Mitte statt, wo D. Rupp zuvor einen Vortrag über ihre Forschungsergebnisse hält.

*The Physical Society of Berlin announced this year's Karl Scheel laureate. Daniela Rupp will receive the award on **Friday, June 22, 2018 at 5 p.m. the Magnus-Haus in Berlin Mitte.***

For more information: <https://www.pgzb.tu-berlin.de/index.php?id=27>

Contact: D. Rupp, Tel. 1280



Daniela Rupp is junior research group leader at the MBI

Daniela Rupp, Nachwuchsgruppenleiterin am MBI