

# MBI Interner Newsletter

Inhalte

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - Februar 2021

Editorial

Personalinformationen / Preise

Betriebsrat / Work Council

Vereinbarkeit Beruf und Familie /Work and Family

Gleichstellung/Equal Opportunity

Projekteinwerbung

Forschungsergebnisse/Research Highlights

EDV/IT

Allgemeines / General

## Editorial

Liebe Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter,

zu Beginn dieses Jahres ist der Austritt des Ferdinand-Braun-Instituts aus dem Forschungsverbund Berlin (FVB) wirksam geworden. Damit hat ein großes Institut mit mehr als 300 MitarbeiterInnen und einem sehr hohen Drittmittelaufkommen den FVB verlassen, auch entfällt die hohe Beteiligung des FBH an den Kosten der Gemeinsamen Verwaltung (GV). Gegenwärtig werden die letzten Schritte einer vollständigen organisatorischen und administrativen Entflechtung vom FVB vollzogen.

Infolge des FBH-Austritts musste die GV um ca. ein Drittel verkleinert werden, um die Verwaltungskosten für die verbleibenden sieben Institute finanzierbar zu halten. Durch eine gemeinsame konstruktive Anstrengung aller Beteiligten gelang es, die neue Struktur der GV ohne Kündigungen zu verwirklichen. Dieser Prozess ist aber noch nicht abgeschlossen, die Umverteilung von Aufgaben und die Rückkehr zu routinemäßigen Abläufen wird noch etwas Zeit in Anspruch nehmen. Wichtige Themen sind auch die Gewinnung eines/einer neuen Geschäftsführers/Geschäftsführerin und die Besetzung ggw. freier Stellen.

In dieser Übergangssituation ist es wichtig, dass alle MitarbeiterInnen des MBI mit den begrenzten Verwaltungskapazitäten verantwortungsvoll und sparsam umgehen. Dies betrifft nicht nur die zentrale GV sondern insbesondere auch unsere lokale Verwaltung. Deren Kapazitäten sind begrenzt und die Abläufe durch die geltenden Pandemieregeln geprägt. Kritisch ist die Situation vor allem bei Beschaffungen und bei der Verwaltung von Drittmitteln. Bitte reduzieren Sie die Zahl an Verwaltungsvorgängen, z.B. durch Bündelung von Anschaffungen in einem Bestellvorgang, und vermeiden Sie die Einreichung unvollständiger Unterlagen in allen Prozessen. Den Abteilungs- und Projektleitern steht für die Budgetplanung die interne Budgetdatenbank zur Verfügung, durch deren konsequente Nutzung man unnötige Anfragen an die Verwaltung vermeiden kann. Und besonders wichtig: begreifen sie die VerwaltungsmitarbeiterInnen als Ihre Arbeitspartner, die genauso wie Sie selbst am Erfolg der Instituts und effizienter Arbeit interessiert sind.

## Editorial

Dear Members of the MBI,

As of January 1 of this year, the Ferdinand-Braun-Institute (FBH) is no longer a member of the Forschungsverbund Berlin (FVB). With FBH, a large institute with some 300 members and a high third-party funding budget has left the FVB, including a loss of the substantial contribution this institute made to the budget of the joint administration (JA). The final steps for a complete organizational and administrative dissolution are currently underway.

As a consequence of the FBH exit, The JA had to be shrunk by approximately one third, in order not to overburden the remaining seven institutes with administrative cost. The joint constructive effort of all parties involved has been successful in implementing the new JA structure without layoffs of staff. The transformation process is not finished yet, and the redistribution on tasks and duties as well as the return to regular operation will still take some time. Important issues are the appointment of a new head of administration and the hiring of staff for currently open positions.

In this transition period, it is important that all members of the MBI make a responsible and economic use of the limited administrative capacities. This holds not only for the JA but in particular for our local administration. The local resources are limited as well and the administrative procedures affected by restrictions due to the COVID pandemic. The situation is most critical with respect to purchasing and the administration of third party funding. Please reduce the number of administrative transactions as far as possible, e.g., by bundling purchase orders, and avoid to submit incomplete documentation in all processes. There is the internal budget database to which the department heads and project leaders have access for planning and following their purchases. A consequent use of the data base avoids unnecessary inquiries to the administration. And of particular importance: Please notice that the members of administration are your colleagues, having the same strong interest in the success of the institute and in efficient work as you.

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

Das Direktorium, die Abteilungsleiter und die Projektleiter sind bei Problemen genauso ansprechbar wie die verantwortlichen MitarbeiterInnen der Verwaltung. Offene Kommunikation ist ein entscheidender Faktor in der gegenwärtigen Übergangssituation die sich gemeinsam durchaus erfolgreich bewältigen lässt.

Für das Direktorium:  
Thomas Elsässer

The board of directors, the department heads and the project leaders are available for discussing problems, as are the responsible members of administration. Open communication represents a key factor for success in the present transition period which we will jointly overcome.

For the Board of Directors:  
Thomas Elsaesser

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts  
(Stand: 10.02.2020 - alphabetische Reihenfolge)

Alonso Blanco, Paula  
studentische HK B1  
Tel. n.n.  
E-Mail: [alonso@mbi-berlin.de](mailto:alonso@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.01.2021

Dr. Amini, Kasra  
Gastwissenschaftler A1  
Tel. n.n.  
E-Mail: [amini@mbi-berlin.de](mailto:amini@mbi-berlin.de)  
Beginn: 15.12.2020

Anus, Muhammad  
studentische HK A1  
Tel. 1257  
E-Mail: [anus@mbi-berlin.de](mailto:anus@mbi-berlin.de)  
Beginn: 07.12.2020

Bender, Victor  
Doktorand T3  
Tel. n.n.  
E-Mail: [vbender@mbi-berlin.de](mailto:vbender@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.12.2020

Deinhart, Victor  
Masterstudent B2  
Tel. 1346  
E-Mail: [deinhart@mbi-berlin.de](mailto:deinhart@mbi-berlin.de)  
Beginn: 30.11.2020

Ewert, Martin  
Elektriker Bt  
Tel. 1528  
E-Mail: [mewert@mbi-berlin.de](mailto:mewert@mbi-berlin.de)  
Beginn: 11.01.2021

Fischer, Tim  
studentische HK EDV  
Tel. 1542  
E-Mail: [fischer@mbi-berlin.de](mailto:fischer@mbi-berlin.de)  
Beginn: 15.12.2020

Dr. Han, Peng  
wissenschaftlicher Mitarbeiter C1  
Tel. 1454  
E-Mail: [phan@mbi-berlin.de](mailto:phan@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.12.2020

Hanke, Ulrike  
Drittmittelsachbearbeiterin Vw  
Tel. 1514  
E-Mail: [hanke@mbi-berlin.de](mailto:hanke@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.01.2021

Mirhadi, Fakhriasadat  
studentische HK C2  
Tel. 1448  
E-Mail: [mirhadi@mbi-berlin.de](mailto:mirhadi@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.01.2021

Dr. Röder, Anja  
Gastwissenschaftlerin A2  
Tel. 1245  
E-Mail: [roeder@mbi-berlin.de](mailto:roeder@mbi-berlin.de)  
Beginn: 07.12.2020



Segovia Guzmán, Miguel Omar  
Doktorand A1  
Tel. n.n.  
E-Mail: [guzmn@mbi-berlin.de](mailto:guzmn@mbi-berlin.de)  
Beginn: 01.02.2021

Sharma, Rohit  
Praktikant A2  
Tel. n.n.  
E-Mail: [rsharma@mbi-berlin.de](mailto:rsharma@mbi-berlin.de)  
Beginn: 18.01.2021



Thomas, Leonard  
studentische HK EDV  
Tel. 1542  
E-Mail: [lthomas@mbi-berlin.de](mailto:lthomas@mbi-berlin.de)  
Beginn: 15.12.2020

Tran, Leo  
Bachelorstudent B2  
Tel. n.n.  
E-Mail: [ltran@mbi-berlin.de](mailto:ltran@mbi-berlin.de)  
Beginn: 30.11.2020

Wittrock, Steffen  
wissenschaftlicher Mitarbeiter B2  
Tel. 1343  
E-Mail: [wittrock@mbi-berlin.de](mailto:wittrock@mbi-berlin.de)  
Beginn: 16.11.2020

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

Ausgeschiedene:  
(Stand: 10.02.2020 - alphabetische Reihenfolge)

Gerbert, Jana	stud. HK, EDV
Hassanpour Yesaghi, Ehsan	Gastwissenschaftler, A1
Hessing, Piet	Doktorand, B2
Kieschke, Robert	technischer Mitarbeiter, EDV
Legler, Florenz	Physiklaborant, B1
Lein, Lothar	Leiter Betriebstechnik, Bt
Petz, Sascha	technischer Mitarbeiter, B1
Saboohi, Faranak	stud. HK, A1
Ussling, Frederic	Gastwissenschaftler, A1
Wang, Zhilin	Masterstudent, T1
Winter, Sabine	adm. Mitarbeiterin, A1

Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/  
Master- & Diplomarbeiten

**M. Kück**

Tailoring the correlation of path-entangled two-photon states  
Master (2020) Huboldt-Universität zu Berlin

**L. Mertenskötter**

Entangled-Photon absorption spectroscopy with varying pump  
wavelength  
Master (2020) Huboldt-Universität zu Berlin

**D. Reiche**

Long-time correlations in nonequilibrium dispersion forces  
Dissertation (2021) Freie Universität Berlin

**M. Schilling**

Digital quantum simulation of bosons  
Master (2020) Huboldt-Universität zu Berlin

Preis



Prize

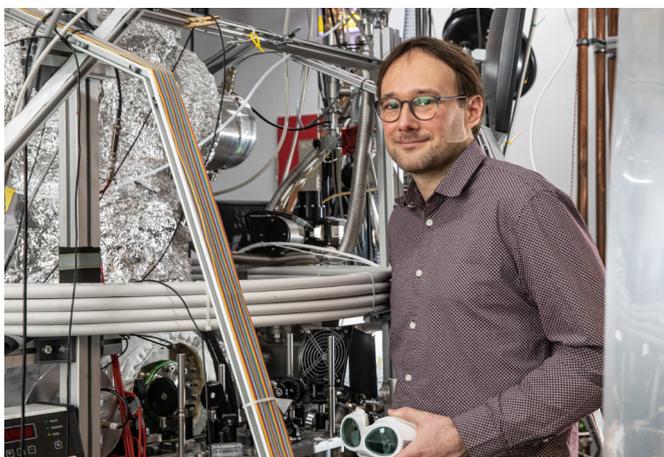
## Chemie in Bewegung – Jochen Mikosch erhält 2 Millionen Euro Fördermittel vom Europäischen Forschungsrat (ERC)

Jochen Mikosch vom Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie erhält einen prestigeträchtigen Consolidator Grant des Europäischen Forschungsrats (ERC). In einem höchst kompetitiven Auswahlprozess wird dieser an etablierte Wissenschaftler mit sieben bis zwölf Jahren Erfahrung seit ihrer Doktorarbeit vergeben, die einen exzellenten Forschungsantrag präsentieren und bereits sehr vielversprechende Forschungsleistungen erbracht haben. Der ERC Consolidator Grant ist mit zwei Millionen Euro dotiert, läuft über fünf Jahre und hat zum Ziel, ein unabhängiges, exzellentes Forscherteam zu konsolidieren. Jochen Mikosch erhält den Grant für Grundlagenforschung zur zeitaufgelösten Strukturabbildung der Dynamik chemischer Reaktionen.

## Chemistry in Motion - Jochen Mikosch receives 2 million Euro of funding from the European Research Council (ERC)

Jochen Mikosch receives a prestigious Consolidator Grant from the European Research Council (ERC). In a highly competitive and thorough procedure it is awarded to established researchers with 7-12 years of experience since completion of their PhD who present an excellent research proposal and already have a scientific track record showing great promise. The ERC Consolidator Grant is endowed with up to 2.0 million Euro over a funding period of 5 years and intended to consolidate an independent, excellent research team from all domains of science. Jochen Mikosch receives the grant to perform basic research on time-resolved structural dynamics of chemical reactions.

Jochen Mikosch ist Gruppenleiter und Projektkoordinator am Max-Born-Institut für nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie (MBI) im Forschungsverbund Berlin. Er hat sich einen Namen für Anwendungen der Attosekundenforschung auf Moleküle und chemische Dynamik gemacht. Nach dem Studium der Physik in Freiburg, Heidelberg und Cambridge (England) hat er 2008 seine Doktorarbeit bei Roland Wester in Freiburg verteidigt und war Postdoc bei Albert Stolow am Nationalen Forschungszentrum von Kanada (NRC) in Ottawa. Er ist seit 2013 am MBI beschäftigt.



Jochen Mikosch is group leader and project coordinator at the Max Born Institute for Nonlinear Optics and Short Pulse Spectroscopy in the Forschungsverbund Berlin. He is known for his studies applying Attosecond Science to molecules and chemical dynamics. Following undergraduate and graduate studies in Freiburg, Heidelberg, and Cambridge (UK), he defended his PhD with Roland Wester in Freiburg in 2008 and went on to a Post-

doctoral fellowship with Albert Stolow at the National Research Council in Ottawa (Canada). He joined the Max-Born-Institute in the fall of 2013.

Moleküle bestehen aus Atomen, die von chemischen Bindungen zusammengehalten werden. In einer chemischen Reaktion kommen sich zwei Moleküle so nahe, dass Bindungen gebrochen werden und neue Bindungen entstehen. Die Zustände während der chemischen Umlagerung, nicht mehr Reaktanden und noch nicht Reaktionsprodukte, nennt man die Übergangszustände. Während dieses extrem kurzen, kritischen Zeitfensters wird der Ausgang der chemischen Reaktion festgelegt. Daher wäre es von grundlegender Bedeutung für unser Ver-

Molecules consist of atoms, which are held together by chemical bonds. In a chemical reaction two molecules come so close that bonds are broken and new bonds are formed. The configurations during the chemical transformation, being neither reactants nor products, are called the transition state. During this ultrashort, critical time window the outcome of the chemical reaction is determined. Experimentally depicting the structural transformations during the transition state would hence be of fundamental importance for chemistry.

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

ständnis der Chemie, wenn die strukturellen Umlagerungen während des Übergangszustandes experimentell abgebildet werden könnten.

Bestrebungen, die strukturellen Umlagerungen während chemischer Reaktionen abzubilden, sind bislang wegen einer konzeptionellen experimentellen Schwierigkeit hinter den Erwartungen zurückgeblieben: dem Startzeit-Dilemma. Normalerweise sind chemische Reaktanden zufällig räumlich zueinander orientiert und in zufälligem Abstand platziert. Mit einem ultrakurzen Laserpuls hat man keine Kontrolle über den präzisen Zeitpunkt, zu dem eine chemische Reaktion stattfindet.

Das bewilligte Projekt c-TSD-p hat zum Ziel, dieses Dilemma zu lösen, indem es zwei Schlüsseltechnologien zusammenbringt. Erstens werden die Reaktanden zunächst in einer wohldefinierten Konfiguration nahe beieinander in Stellung gebracht. Solch ein Komplex erlaubt es, die chemische Reaktion zu einer wohldefinierten Zeit mit einem Femtosekunden-Laserpuls zu starten. Weiterhin kann mit der einstellbaren Wellenlänge des Laserpulses die Geschwindigkeit, mit der sich die beiden Reaktionspartner begegnen, kontrolliert werden. Zweitens wird nun, und zwar für variable zeitliche Verzögerung gegenüber dem ersten Laserpuls, die dreidimensionale Struktur des Übergangszustandes mittels Coulomb-Explosion abgebildet. Coulomb-Explosion ist ein Werkzeug aus dem Baukasten der Attosekundenforschung: Innerhalb eines sehr kurzen Zeitintervalls werden die Bindungselektronen mit einem zweiten Laserpuls entfernt, so dass sich die positiv geladenen atomaren Fragmente voneinander abstossen. Eine experimentelle Messung der koinzidenten Fragmentimpulse erlaubt dann eine Rekonstruktion der sich entwickelnden chemischen Struktur.

Das Projekt c-TSD-p wird Laser-Spitzen-Technologie benutzen, sowohl am MBI als auch an Freie-Elektronen-Lasern wie dem kürzlich in Hamburg fertiggestellten Europäischen XFEL, um damit fundamentale Schlüsselfragen zur Übergangszustandsdynamik zu beantworten. Ein solches Verständnis könnte helfen, chemische Reaktionsmechanismen in Anwendungen, wie etwa der synthetischen Chemie, zu optimieren. Im Rahmen des Projektes werden mehrere Stellen für Doktoranden und Postdocs geschaffen.

Efforts to depict the structural transformations during chemical reactions have thus far fallen short due to a conceptual experimental problem: The start-time dilemma. In conventional samples the reactants are distributed over a wide range of spatial configurations and even with an ultrashort laser pulse there is no external control over the precise moment when a reaction takes place.

The funded project c-TSD-p aims to solve this dilemma by bringing together two key ingredients: First, reaction partners are held closely together, in a well-defined initial configuration, within a reaction precursor. Such a complex allows initiating the chemical reaction at a defined time with a femtosecond laser pulse. Moreover, the tunable wavelength of the laser pulse allows controlling the speed with which the two reaction partners encounter each other. Second, as a function of delay after the initiating laser pulse, the three-dimensional structure of the transition state is imaged with Coulomb Explosion Imaging. Coulomb explosion is a tool from the toolbox of Attosecond Science: Within a very short time the binding electrons are removed with a second laser pulse such that the positively charged atomic fragments repel each other. An experimental determination of the fragment momenta in coincidence allows constructing the evolving chemical structure.

c-TSD-p will use cutting edge laser technology, both at MBI and at X-ray free electron lasers such as the recently commissioned European XFEL in Hamburg to answer key fundamental questions surrounding transition state dynamics. Such understanding could help to figure out mechanisms of optimizing reaction pathways in applications, such as in synthetic chemistry. Within the project several positions for PhD students and Postdocs will become available.

Contact: J. Mikosch, Tel. 1295

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

Preis

Prize

## Dr. Michael Schneider erhält den European XFEL Young Scientist Award

Der European XFEL Young Scientist Award würdigt herausragende Beiträge von jungen Forschern in der Anfangsphase ihrer Karriere zur Forschung am European XFEL. Michael Schneider erhielt den Preis für seine wichtigen Beiträge in drei verschiedenen Bereichen im Zusammenhang mit Beugungsexperimenten mit weicher Röntgenstrahlung am European XFEL.



## Dr. Michael Schneider receives the European XFEL Young Scientist Award

The European XFEL Young Scientist Award recognizes outstanding contributions of young researchers in the early stages of their career to research at European XFEL. Michael Schneider received the award for his important contributions in three distinct areas pertaining to diffraction experiments with soft x-rays at European XFEL.

Die von Freie-Elektronen-Lasern erzeugten Röntgenpulse werden typischerweise auf wenige Mikrometer fokussiert, um extreme Röntgenintensitäten an der Probe im wissenschaftlichen Instrument zu erreichen. In seiner Doktorarbeit entwickelte Michael Schneider einen Ansatz zur genauen Beobachtung des Strahlprofils auf einer Festkörperprobe, die in einem Beugungsexperiment mit Röntgenpulsen bestrahlt wird. Das Beugungsmuster wird dabei in Transmission auf einem 2D-Detektor aufgenommen. Michael Schneiders Ansatz erlaubt es nun, gleichzeitig mit dem Beugungsbild der zu untersuchenden Probe ein Bild der räumlichen Intensitätsverteilung des Röntgenpulses auf der Probe aufzunehmen – und zwar mit dem selben Detektor. Dieser Ansatz ermöglicht quantitative Untersuchungen von Effekten, die bei sehr hohen Röntgenintensitäten in Beugungsexperimenten auftreten. Als eigenständiges und einfach zu nutzendes Werkzeug wird sein „Curved Grating Monitor“-Ansatz nun routinemäßig zur Abbildung und Optimierung des Röntgenfokus an Instrumenten für weiche Röntgenstrahlung an verschiedenen Synchrotronstrahlungsquellen und Freie-Elektronen-Lasern weltweit eingesetzt, insbesondere auch am Spectroscopy and Coherent Scattering (SCS) Instrument des European XFEL.

Mit der Entwicklung einer neuen Generation von 2D-Röntgendetektoren können große Beugungsmuster mit noch nie dagewesener Geschwindigkeit aufgenommen werden, was neue Möglichkeiten für die Forschung eröffnet. Am European XFEL ermöglicht der DSSC-Detektor die Aufnahme von Beugungsmustern mit weicher Röntgenstrahlung und erzeugt dabei einen maximalen Datenstrom von etwa 17 GB pro Sekunde. In den ersten wissenschaftlichen Messzeiten am European XFEL – kurz nach der Ankunft des DSSC-Detektors am SCS-Instrument – arbeitete Michael Schneider zusammen mit der XFEL-Gruppe für Datenmanagement an der Entwicklung einer Softwareammlung, die das Filtern, Sortieren und Durchforsten der DSSC-Daten in kürzester Zeit ermöglicht. Die Software erlaubt es den Forschern, die wissenschaftlich relevanten Informationen schnell aus dem riesigen Datenstrom zu extrahieren und ihre Experimente entsprechend zu steuern, was eine effiziente

X-ray pulses delivered by x-ray free-electron lasers are typically focused to a few-micrometer size in order to achieve extreme x-ray intensities at the sample inside the scientific instrument. In his PhD work, Michael Schneider developed an approach to monitor the beam footprint on a solid transmission sample in a diffraction experiment. In essence, along with the diffraction pattern from a sample of interest captured on a 2D detector, his approach allows to simultaneously record an image of the spatial intensity distribution of an x-ray pulse on the sample giving rise to that particular diffraction pattern. This approach allows quantitative studies of effects arising at very high x-ray intensities in diffraction experiments. As an easy to use stand-alone tool, his “curved grating monitor” approach is now routinely used to image and optimize the focal spot at soft x-ray beamlines at various synchrotron radiation sources and free electron lasers world-wide, including the Spectroscopy and Coherent Scattering (SCS) instrument at European XFEL.

With the advent of a new generation of pixelated x-ray detectors, large diffraction patterns can be recorded with unprecedented speed, opening new possibilities for research. At European XFEL, the DSSC Detector allows to record diffraction patterns with soft x-rays, generating a peak data stream of about 17 GB per second. In early science beamtimes at European XFEL just after the arrival of the DSSC detector at the SCS instrument, Michael Schneider worked together with the XFEL data group to develop a software toolkit enabling on-the-fly filtering, sorting and inspection of the DSSC scattering data. The toolkit allows researchers to quickly extract the scientifically relevant information out of the huge data stream and steer their experiments accordingly, allowing for efficient use of beamtime. Participating in several European XFEL beamtimes, Schneider used his physics insight to adapt his toolkit to the different needs of the respective experiments. The award committee recognized Michael Schneider’s contribution to enable early science with the DSSC detector and his community spirit of making the software package publicly available – the toolkit is now integrated into the SCS analysis software package.

# MBI Interner Newsletter

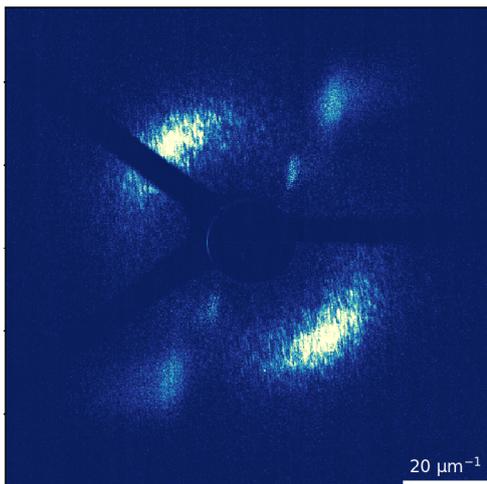
12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

Nutzung der zur Verfügung stehenden Messzeit ermöglicht. Michael Schneider war an mehreren Messkampagnen am European XFEL beteiligt und nutzte dort sein physikalisches Verständnis, um seine Software an die unterschiedlichen Bedürfnisse der jeweiligen Experimente anzupassen. Das Preiskomitee würdigte Schneiders Beitrag zur Ermöglichung wissenschaftlicher Experimente mit dem DSSC-Detektor in der Frühphase der Nutzung des European XFEL. Dabei hob es insbesondere auch seinen Gemeinschaftsgeist hervor, das Softwarepaket öffentlich zugänglich zu machen – es ist nun in die Standardsoftware zur Datenanalyse an SCS integriert und für alle Nutzer zugänglich.

Im Rahmen seiner eigenen wissenschaftlichen Agenda war Michael Schneider Teil eines Teams unter der Leitung des Max-Born-Instituts (MBI), Berlin, und des Massachusetts Institute of Technology (MIT), das untersuchte, wie spezielle magnetische Texturen in dünnen metallischen Schichten mit ultrakurzen Infrarot-Laserpulsen erzeugt werden können. Dazu wurden Beugungsexperimente mit dem DSSC-Detektor durchgeführt, um insbesondere zu verstehen, wie die Topologie der magnetischen Strukturen in dem Prozess verändert wird. Im Zusammenspiel mit theoretischen Simulationen waren die zeitaufgelösten Beugungsexperimente am SCS-Instrument entscheidend um die Dynamik des Prozesses zu untersuchen und so den Mechanismus der Topologieänderung zu entschlüsseln. Die Ergebnisse wurden in der Fachzeitschrift Nature Materials im Jahr 2020 präsentiert.

Along the lines of his own scientific agenda, Schneider was part of a team lead by Max Born Institute (MBI), Berlin, Germany, and the Massachusetts Institute of Technology (MIT) investigating how magnetic textures in thin films can be generated with ultrashort infrared laser pulses. Specifically, resonant diffraction experiments were performed using the DSSC detector at SCS in order to understand how the topology of the magnetic structures is changed in the process. In concert with theory, the pump-probe diffraction experiments at SCS were key to probe the dynamics of the process, allowing to unravel the topology-changing mechanism as reported in a publication in Nature Materials in 2020.

Contact: M. Schneider, Tel. 1343



Die Sequenz der Detektorbilder zeigt resonante Kleinwinkelstreuung am European XFEL an magnetischen Strukturen (zwei intensive bananenförmige Bereiche) zusammen mit einem niedrig aufgelösten Realraumabbild des beleuchteten Flecks auf der Probe (zusammen mit einem kleineren zweiten Bild, das durch Röntgenstrahlen mit halber Wellenlänge erzeugt wird). Die Schuss-zu-Schuss Variationen des Röntgenfokus mit Ausschlägen von etwa 3 Mikrometern sind deutlich sichtbar.

The sequence of detector images shows resonant small angle scattering at European XFEL from magnetic structures (two intense lobes) together with a low resolution real-space image of the illuminated spot on the sample (together with a smaller 2nd image generated by x-rays with half the wavelength). The shot-to-shot position jitter of the x-ray focus with excursions of about 3 micrometers is clearly visible.

The sequence of detector images shows resonant small angle scattering at European XFEL from magnetic structures (two intense lobes) together with a low resolution real-space image of the illuminated spot on the sample (together with a smaller 2nd image generated by x-rays with half the wavelength). The shot-to-shot position jitter of the x-ray focus with excursions of about 3 micrometers is clearly visible.

*The movie can be played within Adobe Acrobat. If this is not possible on your computer, view the movie on the MBI website:*

<https://mbi-berlin.de/research/highlights/details/dr-michael-schneider-receives-the-european-xfel-young-scientist-award>

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Betriebsrat

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

in letzter Zeit wurden wiederholt Fragen im Zusammenhang mit Quarantäne, Reisen in Risikogebiete sowie der Entgeltfortzahlung an den Betriebsrat gerichtet. Als einschlägige Rechtsquellen sind hier die SARS-CoV-2- Infektionsschutzmaßnahmenverordnung des Landes Berlin (InfSchMV), das Infektionsschutzgesetz (IfSG) sowie das Entgeltfortzahlungsgesetz (EntgFG) zu nennen.

Zunächst ist eindeutig, dass Reisende, die sich zu einem beliebigen Zeitpunkt innerhalb der letzten 10 Tage in einem sogenannten Risikogebiet aufgehalten haben, sich nach ihrer Rückkehr auf direktem Wege für 10 Tage in häusliche Quarantäne (amtlich auch „Absonderung“ benannt) begeben müssen. So kann das in der Berliner Infektionsschutzmaßnahmenverordnung entnommen werden. Mittels dieser Verordnung wird zudem die Möglichkeit eingeräumt, die Quarantäne bereits nach 5 Tagen zu beenden, sofern zu diesem Zeitpunkt ein Testergebnis über das Nichtvorliegen einer Coronainfektion vorgelegt werden kann.

Mindestens aber bis zum Ablauf dieser 5 Tage **darf im Falle einer Quarantäne das Max-Born-Institut nicht aufgesucht werden**. Deshalb ist es sehr wichtig, dass Sie den jeweils vorgesetzten Direktor sowie Ihren direkten Vorgesetzten unverzüglich darüber informieren, dass Sie von einer Quarantänemaßnahme betroffen und deshalb an der Arbeitsaufnahme im Institut gehindert sind. Danach wird gemeinsam nach einer Möglichkeit gesucht werden, Ihre Arbeitsleistung im Rahmen des mobilen Arbeitens (Homeoffice) zu erbringen und so Ihre Entgeltansprüche zu sichern. Darüber wurde in den „Corona-Updates“ seitens des Direktoriums wiederholt informiert.

Nach dem Infektionsschutzgesetz §56 Abs. 1 besteht der Anspruch auf eine Verdienstausfallentschädigung. Verdienstausfälle, die ursächlich auf eine vermeidbare Reise (z.B. Urlaubsreise in ein Risikogebiet) zurückzuführen sind, sind davon allerdings ausgenommen. Es ist deshalb ratsam, auf solche Reisen nach Möglichkeit zu verzichten. Erschwerend kommt hinzu, dass die rechtlichen Rahmenbedingungen momentan ständig an die sich ändernden Bedingungen angepasst werden.

Den Überblick in dieser Situation zu behalten, ist deshalb nicht einfach. Die aktuelle SARS-CoV-2- Infektionsschutzmaßnahmenverordnung des Landes Berlin finden Sie unter:

<https://www.berlin.de/corona/massnahmen/verordnung/>

Viele Grüße im Namen des Betriebsrates  
Peter Scholze

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

## Works Council

Dear colleagues,

Recently, questions relating to quarantine, travel to risk areas and continued payment of remuneration have been directed to the works council. Relevant legal sources for those are the SARS-CoV-2 Infection Protection Measures Ordinance of the State of Berlin (InfSchMV), the German Infection Protection Act (IfSG) and the Continued Remuneration Act (EntgFG).

First of all, it is clear that travel returnees who were in a defined risk area within the last ten days before returning to Berlin - (§ 2 (17) of the Infection Protection Act as an area with an increased risk of infection with the coronavirus SARS-CoV-2) - are obligated to stay at home in quarantine for a period of 10 days as described in the Berlin Infection Protection Measures Ordinance. The ordinance includes the option of ending the quarantine after 5 days, provided that a negative test result on a corona infection can be presented at this time.

Anyhow, during the quarantine days, the Max Born Institute **may not be entered by no means** at least until these 5 days have elapsed. It is therefore very important that you inform your responsible director and direct supervisor immediately when you are affected by a quarantine measure and being prevented from starting work at the institute. You will get MBI full cooperation to find a way to do your work in the context of mobile work (home office) and thus secure your payment claims. The board of directors repeatedly informed about this in the “Corona Updates”.

According to the Infection Protection Act § 56, Paragraph 1, there is a right to compensate for loss of earnings. However, if it is caused by an avoidable trip (e.g. vacation trip to a risk area) you are excluded from a compensation. It is therefore advisable to avoid such trips. This is made more difficult by the fact that the legal framework is currently constantly being adapted to the changing conditions.

You can find more details of the current SARS-CoV-2 Infection Protection Regulation of the State of Berlin at:

<https://www.berlin.de/corona/en/measures/directive/>

Best regards on behalf of the works council  
Peter Scholze

Legal notice: All information is based on the best of our knowledge. A guarantee for the correctness in the legal sense cannot be given as well as not for the translation.

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Gleichstellung

Liebe Kollegen und Kolleginnen,

heute möchte ich Sie auf drei Punkte aufmerksam machen, die alle etwas damit zu tun haben, wie wir die Gegenwart und Zukunft miteinander gestalten wollen. Ich möchte Anregungen geben, Aufmerksamkeit auf ungewöhnliche Projekte lenken und zuletzt um Unterstützung für den Girls' Day 2021 bitten.

### LaNA – was ist das?

Manche werden es vielleicht schon kennen, einige aber nicht. Daher möchte ich auf ein Netzwerk aufmerksam machen, das schon seit einigen Jahren das Ziel verfolgt, Frauen in der Wissenschaft zu vernetzen. Immer wieder ist erkennbar, dass Frauen viel weniger vernetzt sind als Männer und dies sich bis zu den Führungspositionen niederschlägt. Das Netzwerk will die Sichtbarkeit von Frauen in Naturwissenschaften und Technik signifikant erhöhen - die Präsenz stärken.

Insbesondere den Kolleginnen des MBI möchte ich daher Mut machen, Mitglied dieses Netzwerkes zu werden. Schaut euch auf dieser Webseite um: <https://igafa.de/ladies-network-adlershof-lana/>  
In der Rubrik „LaNA stellt vor“ können Vorschläge gemacht werden für Persönlichkeiten, die die Vielfalt von Adlershof präsentieren und darüber hinaus mit ihrem Engagement und ihren Karrieren etwas Besonderes darstellen.



## Equal Opportunity

Dear colleagues,

Today I would like to talk about three topics in this Newsletter issue. All of them have something to do with how we want to create the present and the future together. I want to give some suggestions, draw your attention to unusual projects and moreover ask for support for the Girls' Day.

### LaNA – what is that?

Some may already know it, but some may not. And so I would like to draw your attention to a network that has had one goal for several years: to network women in science. It still comes up again and again that women are apparently much less networked than men and this is reflected in the existing gender imbalance in leadership positions, too. LaNA - Ladies Network Adlershof - aims to significantly increase the visibility of women in the natural sciences and technology and to strengthen their presence and female careers.

I would like to encourage my colleagues at the MBI in particular to become a member of this network. Take a look around this website: <https://igafa.de/ladies-network-adlershof-lana/>  
In the section „LaNA connect“ suggestions can be made for personalities who represent the manifoldness of Adlershof and are special with their commitment and careers.

## Gesundheits-Netzwerk

Viele Kollegen und Kolleginnen können aktuell ihren sportlichen Aktivitäten nicht so nachgehen, wie sie gerne möchten. Dabei ist aber gerade in einer Zeit, in der wir vermehrt sitzen und uns weniger bewegen um so wichtiger auf diesen Ausgleich zu achten.

Am Standort Adlershof gibt es seit wenigen Jahren das Wista-Gesundheitsnetzwerk. In der Corona-Zeit können viele Angebote nicht als Präsenzangebote wahrgenommen werden.

Aber es gibt weiterhin diverse Online-Angebote. Schaut auf die folgende Webseite und nutzt die kostenlosen Angebote:

<https://www.adlershof.de/gesund/aktuelle-angebote/>

Andere kleinere Videos zum Fitbleiben am Arbeitsplatz könnt ihr hier finden:

<https://www.vamed.com/de/presse-newsroom/press-items-details/?id=19402>

<https://www.vamed.com/de/presse-newsroom/press-items-details/?id=19402>

Ich wünsche Euch, dass Ihr gesund durch diese besondere Zeit kommt. M. Rink (Gleichstellungsbeauftragte)



## Health network

Many colleagues are currently unable to pursue their sporting activities the way they were used to. So, at the time when we sit more and move less, it is important to compensate for the lack of exercise.

For a few years now, the Wista Health network has been in place at the Adlershof campus. With the Corona restrictions many of the sport facilities and classroom courses are currently frozen. But there are still various online offers.

Please inform yourself on the following website where you can find many free offers:

<https://www.adlershof.de/gesund/aktuelle-angebote/>

Other smaller videos on staying fit at work can be found here:

<https://www.vamed.com/de/presse-newsroom/press-items-details/?id=19402>

<https://www.vamed.com/de/presse-newsroom/press-items-details/?id=19402>

I wish you, your teams and your loved ones health and safety during this challenging time. M. Rink (Equal Opportunity Off.)

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020



## Nachwuchs gewinnen mit dem

### Girls' Day 2021

Noch sind die Organisator\*Innen optimistisch, dass der diesjährige bundesweit ausgeschriebene Girls'Day-Tag am 22.4.2021 stattfinden wird. Der Schwerpunkt liegt dabei auf digitalen Angebote.

Aufgrund der Feedbacks in den letzten Jahren bin ich aktuell dabei, den Plan auf 3 Stationen umzustellen und insgesamt die Länge des Aufenthaltes am MBI zu verkürzen. Parallel werde ich dazu mit den Kolleg\*Innen Kontakt aufnehmen, die mich schon in den letzten Jahren tatkräftig bei der Organisation und Gestaltung des Girls'Day am MBI unterstützt haben.

Des Weiteren benötige ich noch Ideen und Unterstützung für digitale Angebote. Inzwischen gibt es viele neue Kollegen und Kolleginnen am MBI und da gibt es bestimmt auch ein paar neue Ideen! Es wäre schön, wenn ihr mit mir Kontakt aufnehmen würdet, und wir zusammen Ideen zur möglichen Umsetzung bringen könnten. Ich möchte gerne bis spätestens Ende Februar 2021 das Programm auf der Plattform bekanntgeben. Hintergrundinformationen (und dann auch später das MBI-Angebot) zum diesjährigen Girls'Day findet man hier:

<https://www.girls-day.de/aktuelles/girls-day/girls-day-digital-2021>

Vielen Dank  
Margret Rink  
(Gleichstellungsbeauftragte)

### Girls' Day 2021

The organizers are still optimistic that this year's nationwide Girls'Day will take place on April 22<sup>nd</sup>, 2021. This time the focus is on digital offers.

Based on the feedback in recent years, I am currently in the process to limit the program to 3 stations in terms of reducing the physical presence at the MBI. At the same time, I will contact the colleagues who actively supported me in the organization and in the making of the program of the Girls'Day at the MBI in the past years.

I also need ideas and support for digital offers. In the meantime there are many new colleagues at the MBI and hopefully there are a few new ideas, too. It would be nice to contact me for putting together our ideas to an eventful and attractive program. I would like to announce the program on the platform by the end of February 2021 at the latest.

Background information (and later on the new program of MBI offers) for this year's Girls'Day can be found here:

<https://www.girls-day.de/aktuelles/girls-day/girls-day-digital-2021>

Many thanks  
Margret Rink  
(Equal Opportunity Officer)

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Projekteinwerbungen

### Bereich A

**Projektbezeichnung:** ERC Consolidator Grant 101003142

c-TSD-p

Time-Resolved Structural Imaging of Chemical Transition

State Dynamics

**Laufzeit:** 01.06.21- 30.05.26

**Projektleiter:** J. Mikosch

**Geldgeber:** EU

**Projektbezeichnung:** AvH Feodor-Lynen Preis

Forschungszuschuss Feodor-Lynen-Rückkehrstipendium

**Laufzeit:** 01.01.21- 31.12.21

**Projektleiter:** O. Kornilov

**Geldgeber:** AvH

### Bereich C

**Projektbezeichnung:** DFG-EL 1197-1

Internationale wissenschaftliche Veranstaltung:

„15. Internationale Femtochemie-Konferenz“ Berlin,

**Laufzeit:** 25.07.21- 30.07.21

**Projektleiter:** T. Elsässer

**Geldgeber:** DFG

**Projektbezeichnung:** Ref. 3.1-1215191- USA-HFST-E

Forschungskostenzuschuss Humboldt für erfahrenen

Wissenschaftler

**Laufzeit:** 01.06.21- 30.11.21

**Projektleiter:** K. Reimann

**Geldgeber:** AvH

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Forschungsergebnisse

### Neue lasergetriebene Quelle liefert Femtosekunden-Röntgenimpulse mit sehr hohem Photonenfluss

Femtosekundenimpulse harter Röntgenstrahlung sind ein wichtiges Werkzeug um strukturelle Änderungen in kondensierter Materie auf atomaren Längen- und Zeitskalen zu enträtseln. Eine neue lasergetriebene Röntgenquelle liefert Femtosekundenimpulse von Kupfer  $K\alpha$  Strahlung bei einer Wiederholrate von 1 kHz mit einem bisher unerreichten Fluss von mehr als  $10^{12}$  Röntgenphotonen pro Sekunde.

Elementare Prozesse in der Physik, Chemie oder Biologie sind mit Veränderungen der atomaren oder molekularen Struktur verknüpft, die auf der Femtosekunden-Zeitskala stattfinden (1 Femtosekunde (fs) =  $10^{-15}$  Sekunden). Ultraschnelle Röntgenmethoden besitzen ein hohes Potential für die direkte Beobachtung solcher Strukturänderungen in Raum und Zeit und die Aufzeichnung von „Filmen“ der Bewegungen von Elektronen, Atomen und Molekülen. Diese vielversprechende Aussicht hat zu einer starken Nachfrage nach Femtosekunden-Impulsen harter Röntgenstrahlung geführt, die in Röntgenstreuungsexperimenten und spektroskopischen Untersuchungen eingesetzt werden.

Gegenwärtig kommen zwei unterschiedliche Konzepte für die Erzeugung ultrakurzer harter Röntgenimpulse zum Einsatz. Zum einen werden Großmaschinen zur Beschleunigung von Elektronen in Kombination mit sog. Undulatoren verwendet, in denen extrem kurze Elektronenpakete intensive Röntgenimpulse abstrahlen. Zum anderen gelangen kompakte Laborquellen zur Anwendung, die auf intensiven Impulsen aus Femtosekunden-Lasersystemen beruhen. Im extrem hohen elektrischen Feld eines Lichtimpulses werden Elektronen aus einem Metalltarget herausgelöst, im Vakuum beschleunigt und erzeugen nach Wiedereintritt in das Target ultrakurze Impulse harter sog. charakteristischer Röntgenstrahlung sowie Bremsstrahlung. Die gleichen Erzeugungsprozesse werden in konventionellen Röntgenröhren ausgenutzt.

Unsere Wissenschaftler vom Projektteam 3.3 haben nun einen Durchbruch in der lasergetriebenen Erzeugung von ultrakurzen Röntgenimpulsen erzielt. Sie demonstrierten einen stabilen Impulszug solcher Röntgenblitze bei einer Wiederholrate von einem Kilohertz (1000 Impulse pro Sekunde) und einem Gesamtfluß von  $10^{12}$  Röntgenphotonen pro Sekunde. Wie sie in der Fachzeitschrift Optics Letters berichten, wurde dieses Ergebnis durch die Kombination eines neuentwickelten optischen Treiberlasers, der Femtosekunden-Lichtimpulse im mittleren Infrarot bei  $5\ \mu\text{m}$  (5000 nm) Wellenlänge erzeugt, mit einem Kupfertarget in einer Transmissiongeometrie erreicht. Die erzeugten harten Röntgenimpulse sind bei einer Wellenlänge von 0.154 nm zentriert.

## Research Highlights

### High-flux table-top source for femtosecond hard X-ray pulses

Femtosecond hard X-ray pulses are an important tool for unraveling structure changes of condensed matter on atomic length and time scales. A novel laser-driven X-ray source provides femtosecond copper  $K\alpha$  pulses at a 1 kHz repetition rate with an unprecedented flux of some  $10^{12}$  X-ray photons per second.

Elementary processes in physics, chemistry, and biology are connected with changes of the atomic or molecular structure on a femtosecond time scale (1 femtosecond (fs) =  $10^{-15}$  seconds). Ultrafast X-ray methods hold strong potential for following structure changes in space and time and generate ‚movies‘ of the motions of electrons, atoms and molecules. This perspective has resulted in a strong demand for femtosecond hard X-ray pulses to be applied in X-ray scattering and spectroscopy.

There are two main approaches to generate ultrashort hard X-ray pulses. The first are sources based on large-scale electron accelerators and undulators in which femtosecond electron bunches radiate bright X-ray pulses. The second are small-frame laboratory sources driven by intense femtosecond optical lasers. Here, electron acceleration occurs in the strong electric field of an optical pulse and X-ray pulses are generated by collisional interaction of such electrons with atoms of a metal target, similar to a conventional X-ray tube.

Researchers of the projectteam 3.3 have now accomplished a breakthrough in table-top generation of femtosecond X-ray pulses by demonstrating a stable pulse train at kilohertz repetition rate with a total flux of some  $10^{12}$  X-ray photons per second. As they report in Optics Letters, the combination of a novel optical driver providing femtosecond mid-infrared pulses around a  $5\ \mu\text{m}$  (5000 nm) wavelength with a metallic tape target in a transmission geometry allows for generating hard X-ray pulses at a wavelength of 0.154 nm with very high efficiency.

The optical driver is based on optical parametric chirped pulse amplification (OPCPA) and provides 80-fs pulses at a central wavelength of  $5\ \mu\text{m}$  with an energy of 3 mJ and a repetition rate of 1 kHz. To generate X-ray pulses, the mid-infrared pulses are tightly focused onto a thin copper target (Fig 1). In an optical cycle of the optical field, electrons are extracted from the copper tape, accelerated in vacuum and steered back to the target. Electrons with a kinetic energy of up to 100 keV reenter the target and generate bright copper  $K\alpha$  pulses at a wavelength of 0.154 nm, accompanied by spectrally broad bremsstrahlung. The longer optical cycle of the mid-infrared pulses compared to pulses at shorter optical wavelengths results in longer acceleration times of the electrons, higher kinetic energies, and eventually higher efficiency in X-ray generation (Fig. 2).

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

Der optische Treiber basiert auf dem Prinzip der nichtlinearen optisch-parametrischen Verstärkung von Licht (OPCPA: Optical Parametric Chirped Pulse Amplification) und liefert 80-fs Impulse bei einer Zentralwellenlänge von 5  $\mu\text{m}$  mit einer Energie von 3 mJ und einer Wiederholrate von 1 kHz. Um die Röntgenstrahlung zu erzeugen werden die Infrarotimpulse auf ein dünnes Kupferband fokussiert (Abbildung 1). In einem optischen Zyklus des Laserlichts werden die Elektronen aus dem Metall herausgezogen, im Vakuum beschleunigt und anschließend zurück in das Kupferband gelenkt. Elektronen mit einer kinetischen Energie von bis zu 100 keV werden im Kupferband abgebremst und erzeugen einerseits charakteristische Kupfer K $\alpha$  Impulse bei einer Wellenlänge von 0.154 nm und spektral breite Bremsstrahlung. Der längere optische Zyklus der Lichtimpulse im mittleren Infrarot führt, im Vergleich zu kürzeren Laserwellenlängen, zu längeren Beschleunigungszeiten, höheren kinetischen Energien der Elektronen und letztendlich einer deutlich höheren Ausbeute bei der Röntgenerzeugung (Abbildung 2).

Die neue lasergetriebene Labor-Röntgenquelle erzeugt im Mittel etwa  $1.5 \times 10^9$  Photonen pro Laserimpuls, die in den vollen Raumwinkel emittiert werden, das entspricht  $1.5 \times 10^{12}$  Röntgenphotonen pro Sekunde (blaue Punkte in Bild 2c). Dieser Photonenfluss ist 30 mal höher als in den bisher genutzten optisch getriebenen Femtosekunden-Quellen harter Röntgenstrahlung, bei denen Impulse aus Ti:Saphir-Lasern (Wellenlänge um 0.8  $\mu\text{m}$ ) verwendet werden (schwarze Punkte in Bild 2c). Die neuen Quellenparameter eröffnen vielversprechende Perspektiven für die Untersuchung ultraschneller Strukturänderungen in kondensierter Materie mittels zeitaufgelöster Röntgenbeugung.

The new table-top X-ray source reaches an average number of Cu-K $\alpha$  photons up to  $1.5 \times 10^9$  photons per pulse in the full solid angle or  $1.5 \times 10^{12}$  photons per second (blue dots in Fig 2c). This photon flux is 30 times higher than from commonly used table-top X-ray sources driven by Ti:sapphire lasers at the central wavelength of 0.8  $\mu\text{m}$  (black dots in Fig 2c). Such source parameters open exciting perspectives for investigating ultrafast structure changes in condensed matter by time-resolved X-ray scattering.

#### Original publication:

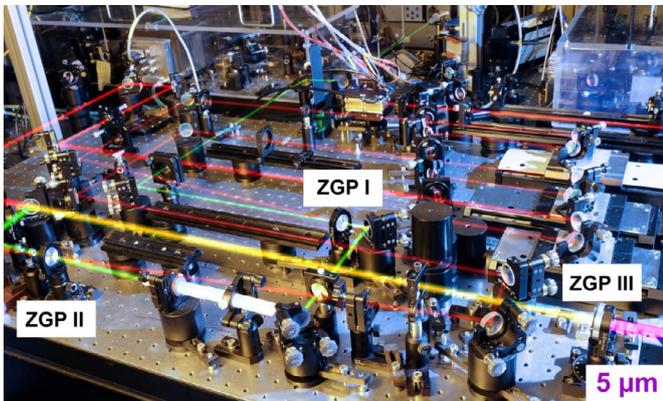
Azize Koç, Christoph Hauf, Michael Woerner, Lorenz von Grafenstein, Dennis Ueberschaer, Martin Bock, Uwe Griebner and Thomas Elsaesser  
„Compact high-flux hard X-ray source driven by femtosecond mid-infrared pulses at a 1 kHz repetition rate “  
Opt. Lett. 46, 210-213 (2021) Open Access

<https://www.osapublishing.org/ol/fulltext.cfm?uri=ol-46-2-210&id=445733>

Contact: A. Koç Tel. 1474, M. Woerner, Tel. 1470, T. Elsaesser, Tel. 1400

# MBI Interner Newsletter

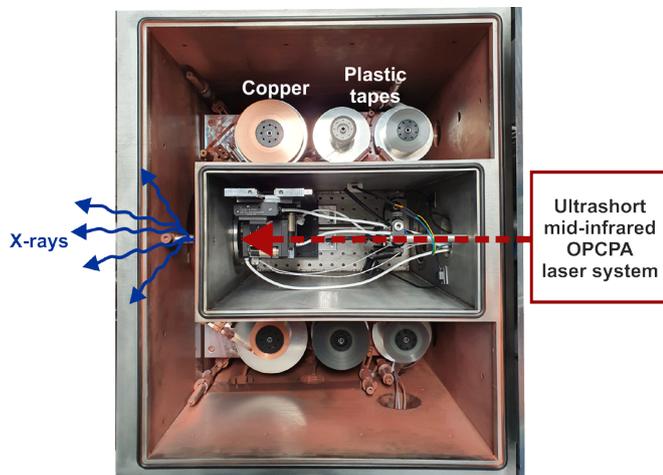
12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020



**Abb. 1:**

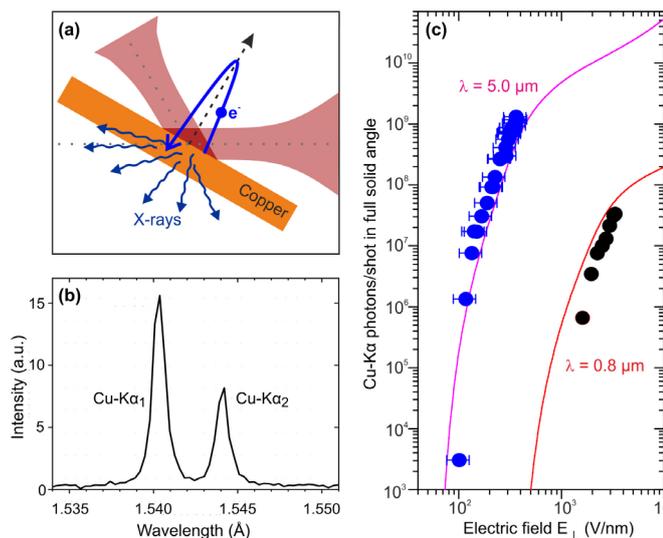
(a) Kompaktes optisches Treibersystem zur Erzeugung von Femtosekunden-Impulsen bei einer Wellenlänge von 5  $\mu\text{m}$  im mittleren Infrarot. Nichtlineare  $\text{ZnGeP}_2$  (ZGP) Kristalle dienen zur Lichtverstärkung.

(b) Kupfer-Bandtarget zur Röntgenerzeugung in einer Vakuumkammer. Intensive Infrarotimpulse (roter Pfeil) werden auf das 20  $\mu\text{m}$  dicke Kupfertarget fokussiert (am Schnittpunkt zu den blauen Pfeilen). Das Kupferband bewegt sich mit einer Geschwindigkeit von 5 cm/s um eine frische Targetfläche für jeden Treiberimpuls bereitzustellen. Die Plastikbänder dienen zur Aufnahme des abgedampften Kupfers und bewegen sich mit.



**Fig. 1:**

(a) Table-top optical driver generating femtosecond mid-infrared pulses at a wavelength of 5  $\mu\text{m}$ . Nonlinear  $\text{ZnGeP}_2$  (ZGP) crystals serve for pulse amplification. (b) Copper tape target for X-ray generation, placed in a vacuum chamber. The intense mid-infrared pulses (red dashed arrow) are focused onto a 20  $\mu\text{m}$  thick copper tape (intercept point of blue x-ray arrows). The copper tape is moved at a velocity of 5 cm/s to provide a fresh target area for each driver pulse. The plastic tapes serve for collection of metallic debris from the target and move in parallel.



**Fig. 2:**

(a) Interaction geometry of the optical driving pulses with the copper target. Femtosecond mid-infrared pulses at a central wavelength of 5  $\mu\text{m}$  (red beams) are focused onto and reflected from a thin copper target. Electrons ( $e^-$ ) are extracted from copper surface, accelerated, and smashed back into the target within an optical cycle of the optical electric field perpendicular to the surface. This results in the generation of hard X-ray pulses and spectrally broad bremsstrahlung.

(b) Spectrum of the hard X-ray pulses on the characteristic X-ray emission lines  $\text{Cu-K}\alpha_1$  and  $\text{Cu-K}\alpha_2$ .

(c) Total number of  $\text{Cu-K}\alpha$  photons per pulse in the full solid angle as a function of the electric field for two different driving wavelengths. With the 5- $\mu\text{m}$  driver wavelength (blue dots) the X-ray yield is significantly higher than for the smaller 0.8- $\mu\text{m}$  wavelength (black dots).

**Abb. 2:**

(a) Wechselwirkungsgeometrie der optischen Treiberimpulse mit dem dünnen Kupfertarget. Femtosekunden-Infrarotimpulse bei 5  $\mu\text{m}$  Wellenlänge (rote Bündel) werden auf ein dünnes Kupfertarget fokussiert und reflektiert. Hierdurch entsteht ein starkes elektrisches Feld senkrecht zur Targetoberfläche. Elektronen ( $e^-$ ) werden innerhalb eines Zyklus dieses Feldes aus dem Metall gelöst, im Vakuum beschleunigt und zum Target zurückgelenkt. Dies führt zur Erzeugung von Impulsen harter Röntgenstrahlung und von Bremsstrahlung.

(b) Spektrum der harten Röntgenimpulse auf den charakteristischen  $\text{K}\alpha$  Linien von Kupfer ( $\text{Cu-K}\alpha_1$  und  $\text{Cu-K}\alpha_2$ ).

(c) Totale Photonenausbeute an  $\text{Cu-K}\alpha$  Strahlung im vollen Raumwinkel als Funktion des elektrischen Feldes. Für die Treiberwellenlänge von 5  $\mu\text{m}$  ist die Ausbeute (blaue Punkte) deutlich höher als für einen optischen Treiber bei 0.8  $\mu\text{m}$  (schwarze Punkte).

## Forschungsergebnisse

### Magnesium-Kontaktionen stabilisieren die makromolekulare Struktur der Transfer-RNA

In biologischen Zellen übersetzt die Transfer-RNA (tRNA) den von der Messenger-RNA (mRNA) übermittelten Bauplan von Proteinen. Neue Ergebnisse der Ultrakurzzeitspektroskopie und theoretischer Analysen zeigen, dass die komplexe gefaltete Struktur der tRNA durch Magnesium-Ionen stabilisiert wird, die sich in Kontakt mit Phosphatgruppen an ihrer Oberfläche befinden.

RNA-Strukturen bestehen aus langen Ketten von Nucleotiden, die sich aus einer Nucleobase z.B. Adenin, Uracil, Cytosin oder Guanin, einer Phosphatgruppe und einem Zuckermolekül zusammensetzen. Die Phosphatgruppen weisen eine negative Ladung auf und bilden zusammen mit den Zuckereinheiten das Rückgrat des Makromoleküls, das in der Zelle als gefaltete, sog. Tertiärstruktur vorliegt. Die durch Röntgenbeugung bestimmte Tertiärstruktur der tRNA von Hefe ist in Abbildung 1 gezeigt. Um diese Struktur in stabiler Form zu erhalten - eine Voraussetzung für ihre zelluläre Funktion - muss die abstoßende elektrische Kraft zwischen den negativ geladenen Phosphatgruppen durch positiv geladene Ionen und Wassermoleküle der Umgebung ausgeglichen werden. Wie das auf molekularer Ebene funktioniert war bisher unverstanden, hinsichtlich der relevanten Anordnung von Ionen und Wassermolekülen bestehen Kontroversen in der wissenschaftlichen Literatur.

Unseren Forschern des Projektteams 3.1 ist es jetzt gelungen Kontaktpaare von positiv geladenen Magnesium-Ionen mit den negativ geladenen Phosphatgruppen als entscheidendes Strukturelement der tRNA zu identifizieren, das die elektrostatische Energie minimiert und so die Tertiärstruktur der tRNA stabilisiert. Die in der Zeitschrift *The Journal of Physical Chemistry B* publizierte Studie verbindet spektroskopische Experimente mit eingehenden theoretischen Analysen der molekularen Wechselwirkungen und Dynamik.

Als Sonde für die Kopplung der tRNA mit ihrer Umgebung dienen molekulare Schwingungen der Phosphatgruppen, deren Frequenz und Infrarotabsorption durch die Wechselwirkung mit Ionen und Wassermolekülen direkt beeinflusst werden. Schwingungsspektroskopie an tRNA-Proben mit unterschiedlichem Magnesiumgehalt erlaubt in Kombination mit zweidimensionaler Infrarotspektroskopie im Femtosekunden-Zeitbereich die Unterscheidung spezifischer lokaler Umgebungen, in denen Phosphatgruppen und ihre Wasserhülle koppeln (Abb. 2). Die Anwesenheit eines Magnesium-Ions in direkter Nachbarschaft einer Phosphatgruppe erhöht die entsprechende Schwingungsfrequenz und führt zum Auftreten einer neuen charakteristischen Absorptionsbande.

## Research Highlights

### Magnesium contact ions stabilize the macromolecular structure of transfer RNA

In cells transfer RNA (tRNA) translates genetic information from the encoding messenger RNA (mRNA) for protein synthesis. New results from ultrafast spectroscopy and in-depth theoretical calculations demonstrate that the complex folded structure of tRNA is stabilized by magnesium ions in direct contact with phosphate groups at the RNA surface.

RNA structures consist of long sequences of nucleotides which are composed of a nucleobase, e.g., adenine, uracil, cytosine or guanine, a negatively charged phosphate group, and a sugar unit. The phosphate groups together with the sugars form the backbone of the macromolecule which exists as a folded structure in the cellular environment, the so-called tertiary structure. The tertiary structure of tRNA from yeast has been determined by x-ray diffraction and is shown in Figure 1. For maintaining this structure, a basic prerequisite for its cellular function, the repulsive electric force between the negatively charged phosphate groups needs to be compensated by positively charged ions and by water molecules of the environment. How this works at the molecular level has remained unclear so far, there are conflicting pictures of ion and water arrangements and interactions in the scientific literature.

Scientists from projectteam 3.1 have now identified contact pairs of positively charged magnesium ions and negatively charged phosphate groups as a decisive structural element for minimizing the electrostatic energy of tRNA and, thus, stabilizing its tertiary structure. Their study which has been published in *The Journal of Physical Chemistry B*, combines spectroscopic experiments and detailed theoretical calculations of molecular interactions and dynamics.

Molecular vibrations of the phosphate groups serve as noninvasive probes of the coupling between tRNA and its aqueous environment. The frequency and infrared absorption strength of such vibrations directly reflects the interactions with ions and water molecules. Vibrational spectroscopy of tRNA samples of different magnesium content together with two-dimensional infrared spectroscopy in the femtosecond time domain allow for discerning specific local geometries in which phosphate groups couple to ions and the water shell (Figure 2). The presence of a magnesium ion in the immediate neighborhood of a phosphate group shifts the asymmetric phosphate stretching vibration to a higher frequency and generates a characteristic infrared absorption band used for detection of the molecular species.

Messungen mit unterschiedlicher Konzentration von Magnesium-Ionen zeigen, dass eine tRNA-Struktur bis zu sechs Kontaktionenpaare ausbildet, bevorzugt an Orten an denen benachbarte Phosphatgruppen einen geringen Abstand aufweisen und somit eine hohe negative Ladungsdichte existiert. Die Kontaktionenpaare liefern den entscheidenden Beitrag zur Absenkung der elektrostatischen Energie und damit zur Stabilisierung der Tertiärstruktur was durch die eingehende theoretische Analyse bestätigt wird. Die Ionenpaare üben elektrische Kräfte auf Wassermoleküle der unmittelbaren Umgebung aus und orientieren sie, eine zusätzliche Stabilisierung der Struktur. Hingegen tragen bewegliche Ionen, die sich in den ersten fünf bis sechs Wasserschichten um die tRNA befinden, nur in geringerem Maß zur Stabilisierung bei.

Die Ergebnisse geben einen detaillierten quantitativen Einblick in die elektrischen Eigenschaften eines biologischen Schlüssel-moleküls. Sie unterstreichen die Bedeutung molekularer Sonden für die Aufklärung der relevanten Wechselwirkungen und die Notwendigkeit theoretischer Beschreibungen auf molekularer Ebene.

#### Original publication:

J. Schauss, A. Kundu, B. P. Fingerhut, T. Elsaesser

„Magnesium contact ions stabilize the tertiary structure of transfer RNA: electrostatics mapped by two-dimensional infrared spectra and theoretical simulations.“

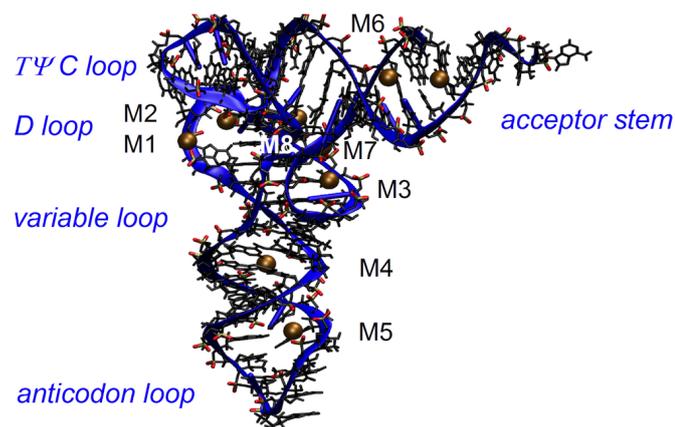
J. Phys. Chem. B (open access)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.0c08966>

Experiments at different concentrations of magnesium ions show that a single tRNA structure forms up to six contact ion pairs, preferentially at locations where the distance between neighboring phosphate groups is small and the corresponding negative charge density is high. The contact ion pairs make the decisive contribution to lowering the electrostatic energy and, consequently, stabilizing the tertiary tRNA structure. This picture is confirmed in a quantitative way by an in-depth theoretical analysis. The ion pairs impose an electrical force on water molecules nearby and orient them in space, again reducing the electrostatic energy. In contrast, mobile ions in the first five to six water layers around tRNA make a smaller contribution to stabilizing tRNA structure.

The new results give detailed quantitative insight in the electric properties of a key biomolecule. They underscore the high relevance of molecular probes for elucidating the relevant molecular interactions and the need for theoretical descriptions at the molecular level.

**Contact:** J. Schauss, Tel. 1497, A. Kundu, Tel. 1414, B.P. Fingerhut, Tel. 1404, T. Elsaesser, Tel. 1400



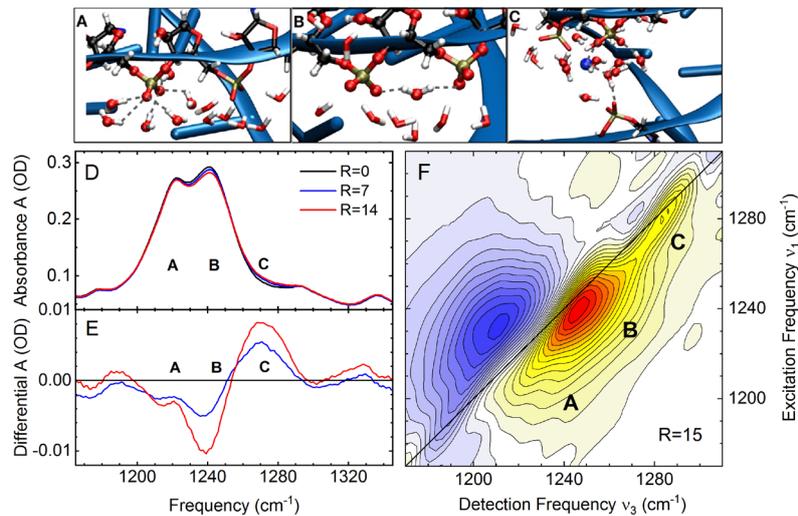
**Fig. 1:**

Tertiary molecular structure of transfer RNA from yeast which encodes the amino acid phenylalanine. The folded structure consists of a sequence of loop and stem regions. The phosphate-sugar backbone is shown as a blue ribbon to which the nucleobases, shown as molecular structures, are attached. The anticodon loop serves for reading the information which is provided by a messenger RNA and used for synthesizing proteins at the acceptor stem. Contact ion pairs are formed preferentially at the sites M1 to M8.

**Abb. 1:**

Tertiäre molekulare Struktur der Transfer-RNA von Hefe, die die Aminosäure Phenylalanin codiert. Die gefaltete Struktur besteht aus einer Abfolge von Schleifen- und Stammregionen. Das Phosphat-Zucker Rückgrat der Struktur ist als blaues Band gezeigt, mit dem die als Molekülstrukturen gezeigten Nucleobasen verbunden sind.

Die Anticodon-Schleife dient zum Auslesen der durch eine Messenger-RNA bereitgestellten Information, mit der am Akzeptorstamm Proteine aus Aminosäuren hergestellt werden. An den Stellen M1 bis M8 werden bevorzugt Kontaktionenpaare gebildet.



## Abb. 2:

(A-C) Aus theoretischen Simulationen ermittelte Anordnungen von Phosphatgruppen (PO<sub>4</sub>)<sup>-</sup> (Phosphor: golden, Sauerstoff: rot), Wassermolekülen H<sub>2</sub>O (Sauerstoff rot, Wasserstoff weiß) und Magnesium-Ionen (blau). Das restliche Rückgrat der RNA-Struktur ist als blaues Band gezeigt. In (A) ist die Phosphatgruppe von sechs Wassermolekülen umgeben, in (B) von einer geordneten Wasserstruktur, in (C) bildet ein Magnesium-Ion ein Kontaktpaar mit einem Sauerstoffatom der Phosphatgruppe. (D) Infrarotabsorptionsspektrum der asymmetrischen Phosphatstretschwingung von tRNA für verschiedene Magnesiumkonzentrationen. Die Größe R gibt das Verhältnis der Magnesiumkonzentration zur tRNA-Konzentration in der Probe an. Die in (A-C) gezeigten Geometrien führen zu den drei unterschiedlichen Absorptionsbänden A, B und C. Mit zunehmender Magnesiumkonzentration nimmt die Absorption von Kontaktpaaren (Komponente C) zu. (E) Differenzinfrarotspektren, die aus den Daten in Teilbild (D) gewonnen sind. Hier tritt die Absorption der Kontaktpaare als positive Bande hervor. (F) Zweidimensionales Infrarotspektrum von tRNA für R=15. Die Beiträge A, B und C zur Infrarotabsorption führen zu getrennten Signalkomponenten (gelb-rote Konturen). Aus der Form des Signals lässt sich die ultraschnelle Schwingungsdynamik erschließen.

## Fig. 2:

(A-C) Spatial arrangements of phosphate groups (PO<sub>4</sub>)<sup>-</sup> (phosphorus: golden, oxygen: red), water molecules H<sub>2</sub>O (oxygen: red, hydrogen: white) and magnesium ions (blue) as derived from theoretical simulations. The remaining backbone is shown as a blue ribbon. In (A) the phosphate group is surrounded by six water molecules, in (B) by an ordered water structure. In (C) a magnesium ion forms a contact pair with an oxygen of the phosphate group. (D) Infrared absorption spectrum of the asymmetric phosphate stretching vibration of the phosphate group of tRNA for different magnesium concentrations. The quantity R is the ratio of magnesium to tRNA concentration in the sample. The molecular geometries shown in (A-C) result in three different infrared absorption bands A, B and C. With increasing magnesium concentration, the relative strength of component C (contact ion pairs) increases. (E) Differential infrared spectra derived from the data in panel (D). The absorption of contact ion pairs appears as a positive band. (F) Two-dimensional infrared spectrum of tRNA for R=15. The components A, B and C of infrared absorption lead to separate signal contributions (yellow-red contours). The shape of the different bands encodes ultrafast vibrational dynamics of tRNA in its ion/water environment.

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Forschungsergebnisse

### Aus Weiß wird (Extrem)-Ultraviolett

Forscher des Projektteams 2.1 (MBI) haben eine neue Methode entwickelt, um die spektrale Breite von extrem-ultraviolettem (XUV) Licht zu modifizieren. Durch die Anwendung eines neuartigen Schemas für die Phasen Anpassung in einer Vier-Wellen-Mischung konnten sie die spektrale Breite von anfangs breitbandigem Licht um einen Faktor von mehr als Hundert reduzieren. Die detaillierten experimentellen und theoretischen Ergebnisse wurden nun in Nature Photonics veröffentlicht.

Licht, so wie es z.B. von der Sonne ausgestrahlt wird, besteht aus vielen verschiedenen Farben und erscheint typischerweise als weiß. Manchmal erreichen jedoch nur bestimmte Farben unsere Augen, was zu beeindruckenden Phänomenen wie der Abendröte führen kann. Für technische und wissenschaftliche Anwendungen, für die eine bestimmte Farbe benötigt wird, können Prismen oder Beugungsgitter verwendet werden, um diese Farbe aus weißem Licht herauszufiltern. Das meiste Licht geht dabei jedoch verloren, was zu niedrigen Lichtintensitäten führt.

Nichtlineare optische Techniken haben es ermöglicht, die Farbe von Licht zu ändern sowie die spektrale Bandbreite zu modifizieren, was zu deutlich höheren Lichtintensitäten führt. Wie in Abb. 1 dargestellt ist, kann so Licht mit einer spezifischen Farbe aus breitbandigem Licht (wie z.B. weißem Licht) erzeugt werden oder umgekehrt. Diese Techniken sind weitverbreitet in spektroskopischen Anwendungen, für Abbildungen sowie für die Erzeugung von ultrakurzen Laserpulsen. Nichtlineare optische Techniken sind jedoch nicht weitverbreitet im XUV-Bereich des elektromagnetischen Spektrums. Dieser Bereich ist von steigendem Interesse für verschiedenste Anwendungen wie z.B. der Attosekunden-Wissenschaft sowie der EUV-Lithographie.

Ein Forscherteam vom Max-Born-Institut hat kürzlich ein neues Konzept demonstriert, um schmalbandige Laserpulse im XUV-Bereich zu erzeugen. Dabei haben sie breitbandiges weißes Licht im sichtbaren Bereich mit breitbandigem Licht im vakuum-ultravioletten (VUV) Bereich kombiniert. Nachdem diese beiden Lichtpulse gleichzeitig durch einen dichten Jet von Krypton-Atomen propagiert sind, wurde ein neuer Laserpuls im XUV-Bereich erzeugt. Bemerkenswerterweise war die spektrale Breite mehr als hundertfach schmaler verglichen mit der Breite der sichtbaren und VUV-Pulse.

Die Wissenschaftler haben dabei ein Schema verwendet, das als Vier-Wellen-Mischung bekannt ist. Dabei absorbiert ein Krypton-Atom zwei sichtbare Photonen und ein VUV-Photon,

## Research Highlights

### White turns into (extreme-)ultraviolet

Researchers from the projectteam 2.1 have developed a new method to modify the spectral width of extreme-ultraviolet (XUV) light. By employing a novel phase-matching scheme in four-wave mixing, they could compress the spectral width of the initial broadband light by more than hundred times. The detailed experimental and theoretical results have been published in Nature Photonics.

Light, as emitted by the sun, consists of many different colors and typically appears as white. Sometimes, however, only certain colors reach our eyes, leading to stunning phenomena like an afterglow. For technical or scientific applications that require a specific color, gratings and prisms can be used to extract this color from the white light. However, most of the incoming light is lost during this process, and the light intensity at the exit is very low.

Nonlinear optical techniques have made it possible to change the color of light and modify its spectral bandwidth without compromising the intensity. As illustrated in Fig. 1, this enables the generation of light with a specific color from broadband light (such as white light) or vice versa. These techniques are widely applied in spectroscopy, imaging, and for the generation of ultrashort laser pulses. However, nonlinear optical techniques are not readily available in the XUV region of the electromagnetic spectrum. This region is of increasing interest for various applications, including attosecond science and EUV lithography.

A team of researchers from the Max Born Institute has recently demonstrated a new concept to generate narrowband laser pulses in the XUV range. They combined broadband white light in the visible region with light having a broad spectrum in the vacuum-ultraviolet (VUV) region. After both of these light pulses simultaneously propagated through a dense jet of krypton atoms, a new laser pulse in the XUV range was generated. Remarkably, the spectral width of the new XUV pulse was more than hundred times narrower compared to the initial visible and VUV pulses.

The scientists employed a scheme known as four-wave mixing, where one krypton atom absorbs two visible photons and one VUV photon, leading to the emission of one XUV photon. Due to energy conservation, the emitted XUV photon must have a frequency equal to the sum of the frequencies of all three absorbed photons. At the same time, due to momentum conservation, the velocity of the incoming light wave has to

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

was zur Aussendung eines XUV-Photons führt. Aufgrund des Prinzips der Energieerhaltung muss die Frequenz des emittierten XUV-Photons der Summe der Frequenzen der drei absorbierten Photonen entsprechen. Außerdem besagt die Impulserhaltung, dass die Geschwindigkeit der eingehenden Welle der Geschwindigkeit der ausgesendeten Welle im Krypton-Jet entsprechen muss. Diese Geschwindigkeit ist frequenzabhängig und ändert sich sehr schnell in der Nähe einer atomaren Resonanz.

Um den schmalbandigen XUV-Laserpuls zu erzeugen, wählen die Forscher einen Bereich in der VUV-Region, der fernab jeder Resonanz liegt, sowie eine XUV-Frequenz, die sich zwischen zwei Resonanzen befindet. Dadurch war es ihnen möglich, die Geschwindigkeit der eingehenden Wellen aus einem breiten spektralen Bereich der Geschwindigkeit der ausgehenden Welle in einem sehr schmalen Bereich aneinander anzugleichen. Dies wird in Abb 2 illustriert: In der linken Seite ist die Absorption im VUV-Bereich über ein spektral breites Intervall dargestellt (blaue Fläche), während auf der rechten Seite ein spektral schmales Intervall im XUV-Bereich dargestellt ist (violette Fläche). Der Brechungsindex (gestrichelte rote Kurve) – und damit die Lichtgeschwindigkeit – nimmt in beiden Bereichen ähnliche Werte an und kann mit Hilfe zweier Photonen aus dem sichtbaren Spektrum (horizontale Pfeile) angepasst werden. Die Illustration verdeutlicht, dass sich dadurch ein breites VUV-Spektrum (mit einer relativ flachen Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Wellenlänge) in ein schmalbandiges XUV-Spektrum umwandeln lässt, wo die Abhängigkeit der Geschwindigkeit von der Wellenlänge nahezu vertikal ist.

Die Erzeugung von schmalbandigen XUV-Laserpulsen ist von Interesse für Anwendungen in der Elektronenspektroskopie, für die Studie von resonanten Übergängen und für bildgebenden Methoden für Nanostrukturen. In der Zukunft könnte die Methode auch in die entgegengesetzte Richtung angewandt werden, d.h. um XUV-Pulse spektral zu verbreitern. Dies könnte die Erzeugung sehr kurzer XUV-Pulse durch Freie-Elektronen-Laser und weiche Röntgenlaser ermöglichen.

#### Original publication:

L. Drescher, O. Kornilov, T. Witting, V. Shokeen, M. J. J. Vrakking and B. Schütte  
„Extreme-ultraviolet spectral compression by four-wave mixing.“  
Nature Photonics

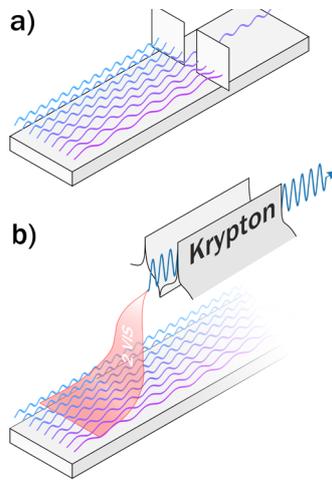
<https://www.nature.com/articles/s41566-020-00758-8>

match the velocity of the outgoing wave inside the mixing medium. This velocity changes very fast close to an atomic resonance.

To generate the narrowband XUV laser band, the researchers chose a VUV spectral range quite far away from any resonance and a target XUV range between two resonances. In doing so, they were able to match the velocities of a broad range of incoming wavelengths to a narrow region of outgoing wavelengths. In Fig. 2, on the left side, absorption in the VUV over a broad spectral range (blue area) is indicated. The red dashed curve indicates the frequency-dependent refractive index, which is a measure of the light velocity. On the right side, a narrow spectral region in the XUV range (violet area) is shown. In these regions, the light travels approximately at the same speed, i.e., with a similar refractive index. These velocities can be matched by the near-horizontal arrows indicating the photons in the visible spectrum. The illustration shows that this allows converting a broadband VUV spectrum with a relatively flat wavelength-velocity dependence into a narrowband XUV pulse, where the wavelength-velocity dependence is near vertical.

The generation of narrowband XUV pulses is interesting for applications such as electron spectroscopy, the investigation of resonant transitions, and the coherent diffractive imaging of nanoscale structures. In the future, the new method could also be used in the opposite direction, i.e., to spectrally broaden XUV pulses, which may result in the generation of very short XUV pulses from sources such as free-electron lasers and soft-X-ray lasers.

Contact: B. Schuette, Tel. 1295, L.Drescher, Tel. 1207



**Abb. 1:**

Konzepte für die Erzeugung einer bestimmten Farbe

(a) Mithilfe eines Prismas oder eines Gitters ist es möglich, eine gewählte Farbe aus einem breiten Spektrum auszuwählen. Dabei geht jedoch ein Großteil des Lichts verloren.

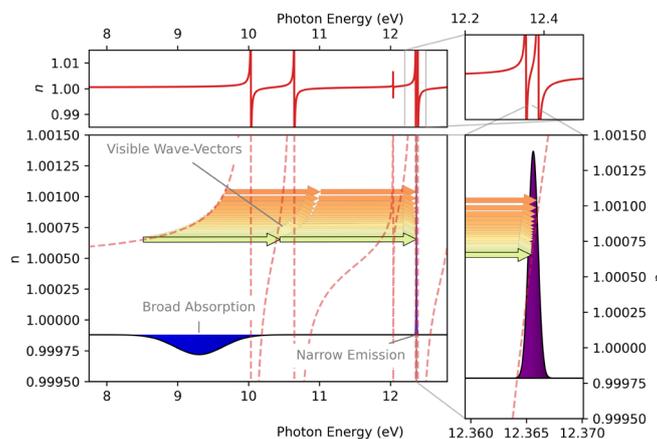
(b) Durch Anwendung von Techniken der nichtlinearen Optik wie der Vier-Wellen-Mischung in Krypton kann eine gewählte Farbe aus dem gesamten Spektrum erzeugt werden.

**Fig. 1:**

Concepts for the generation of a specific color

(a) A specific color can be selected from a broadband light source using e.g. a prism or a grating. This comes, however, at the expense of losing most of the light.

(b) By applying a nonlinear optical technique such as four-wave mixing in krypton, it is possible to generate a specific color using all the available light at different colors.



**Abb. 2**

Schema der spektralen Kompression im XUV-Bereich:

Der Brechungsindex ist von der Photonenenergie abhängig (gestrichelte rote Kurve). Im Bereich um 9.2 eV ist die Änderung des Brechungsindex vergleichsweise langsam (links), im Bereich um 12.365 eV hingegen sehr schnell. Daher kann eine breite Absorption (blaue Fläche) mit Hilfe zweier Photonen aus dem sichtbaren Spektrum (dargestellt durch die Pfeile) zu einer schmalbandigen Emission (violette Fläche) führen.

**Fig. 2:**

XUV spectral compression scheme:

The refractive index as a function of the photon energy is shown by the red dashed curve. In the region around 9.2 eV it changes comparably slowly (left side), whereas it changes very fast in the region around 12.365 eV. Therefore, a broadband absorption (blue area) can lead to a narrowband emission (violet area) with the help of two visible photons (shown by the arrows).

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

## Forschungsergebnisse

### Ausweitung der Längenskala für ab-initio Berechnungen der elektronischen Struktur in Festkörpern

Die Dichtefunktionaltheorie (DFT) hat einen enormen Einfluss auf die Festkörperphysik und ist aufgrund ihrer Recheneffizienz das Herzstück der modernen computerbasierten Materialforschung. Während DFT ein tiefes Verständnis mikroskopischer Eigenschaften bietet, kann sie bisher nichts über die Physik auf größeren, mesoskopischen Längenskalen aussagen. Beispiele für Probleme auf dieser Längenskala sind langreichweitige Quasiteilchen, Magnonen, Skyrmionen, magnetische Domänen oder räumlich abhängige elektrische Felder. Da es sich bei der DFT um eine formal exakte Theorie handelt, ist die zugrundeliegende Physik für solche Phänomene zwar leicht zugänglich, die tatsächlichen Berechnungen bleiben jedoch sehr schwierig. Während es prinzipiell möglich ist, immer größere Superzellen zu verwenden, stößt man in der Praxis schnell an die Grenze der Berechenbarkeit.

Forscher des MBI haben nun zusammen mit Kollegen des Max-Planck-Instituts für Mikrostrukturphysik, Halle, und des Fritz-Haber-Zentrums für Molekulare Dynamik, Jerusalem, einen grundlegend anderen Ansatz entwickelt, um die Längenskala von DFT-Rechnungen drastisch zu erweitern, ohne die Rechenkosten signifikant zu erhöhen. Wie in der Fachzeitschrift *Physical Review Letters* berichtet wird, beruht der Ansatz auf veränderten Bloch-Zuständen; dazu wird eine zusätzliche Summe in den Bloch-Zuständen über ein feineres Gitter im reziproken Raum um jeden k-Punkt eingeführt. Die resultierenden Dichten werden damit zu einer Fourier-Reihe kontrollierbarer Periodizität, die bis in den Nanometerbereich reichen kann.

Um die Leistungsfähigkeit der neuen Methode zu demonstrieren, haben die Wissenschaftler eine Berechnung durchgeführt, die für eine herkömmliche Superzelle zu groß ist. Die Berechnungen wurden für 3456 LiF-Einheiten in einem willkürlichen Potenzial durchgeführt - zur Demonstration der Methode in Form eines Elchs. Die Berechnung wurde auf 480 CPU-Kernen durchgeführt und jede Iteration dauerte etwa 40 Minuten. Konvergenz der Berechnung wurde in 24 Iterationen erreicht. Dieses Leistungsniveau für eine Berechnung mit allen Elektronen des Systems illustriert, dass physikalische Phänomene, die Modulationen des elektronischen Zustands über Hunderte oder Tausende von Einheitszellen beinhalten, mit diesem Ansatz bearbeitet werden können. Damit wird ein Weg zur Berechnung von mesoskopischen Phänomenen geebnet, wie z.B. der Konfiguration von magnetischen Domänenwänden oder Skyrmionen – deren Studium auf der Basis von ab-initio Methoden war bisher zu rechenaufwändig und damit praktisch unmöglich.

## Research Highlights

### Extending solid-state electronic structure calculations to ultra long-range length scales

Density functional theory (DFT) has had a tremendous impact on solid-state physics and is, due to its computational efficiency, at the heart of modern computer based material research. While DFT offers in-depth understanding of microscopic properties, so far it cannot tell anything about physics on larger, mesoscopic length scales. Such effects include long-ranged quasiparticles, magnons, skyrmions, magnetic domains, or spatially dependent electric fields. As DFT is a formally exact theory, the underlying physics for such phenomena is readily at hand, yet actual calculations remain the very difficult. While it is, in principle, possible to use ever larger super-cells, in practice one quickly reaches the limit of computational viability.

Researchers from MBI together with colleagues from Max-Planck-Institute for Microstructure Physics, Halle, and Fritz Haber Center for Molecular Dynamics, Jerusalem, have now developed a fundamentally different approach to drastically extend the length scale of DFT calculations without significantly increasing the computational cost. As reported in the journal *Physical Review Letters*, the approach relies on altered Bloch states by introducing an additional sum in the Bloch states over a finer grid in reciprocal space around each k-point. The resulting densities then become a Fourier series with a controllable periodicity, which may extend to nanometers.

To demonstrate the power of the new method, the scientists have performed a calculation which is too large for a conventional super-cell. Calculations were performed for 3456 LiF units under a random potential - for demonstration purposes in the shape of an Elk. The calculation was performed on 480 CPU cores and each iteration took about 40 minutes. The convergence was achieved in 24 iterations. This level of performance for an all-electron calculation indicates that physical phenomena involving modulations of the electronic state over hundreds or thousands of unit cells are within reach of this approach, paving the way to calculations of mesoscopic systems, such as magnetic domain walls or skyrmions, which have so far been too “computationally expensive” and hence out of reach for ab-initio methods.

#### Original publication:

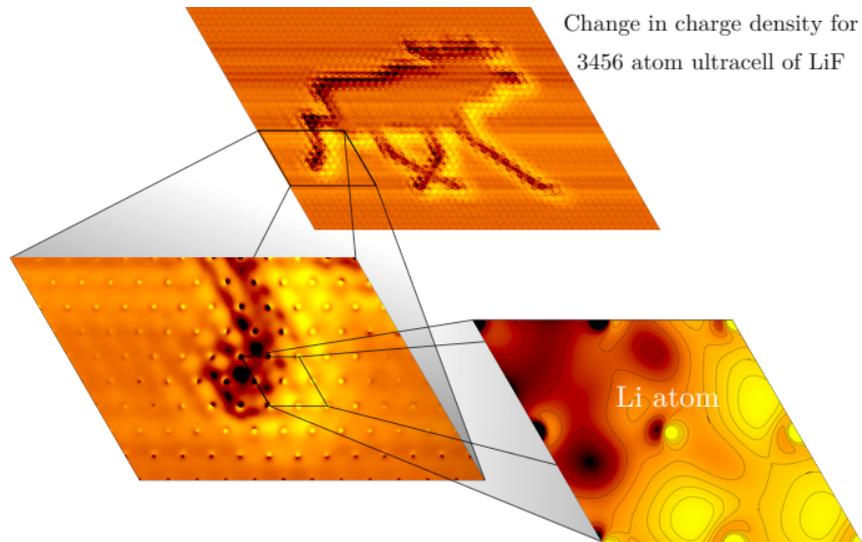
T. Müller, S. Sharma, E. K. U. Gross, and J. K. Dewhurst  
„Extending Solid-State Calculations to Ultra-Long-Range Length Scales“  
*Phys. Rev. Lett.* 125, 256402 – Published 16 December 2020

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.125.256402>

Contact: S. Sangeeta Sharma, Tel. 1350

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020



**Abb.:** Selbstkonsistente Dichte für eine LiF Zelle mit 3456 Atomen in einem künstlichen externen Potential. Die Physik auf der Längenskala eines einzelnen Atoms und auf der im Vergleich dazu sehr großen Längenskala des Potentials kann mit der gleichen Methodik behandelt werden, dadurch werden Probleme auf mesoskopischen Längenskalen erstmals für DFT Berechnungen zugänglich.

**Fig.:** Selfconsistent density for a 3456 atom cell of LiF with an artificial external potential. The physics at the length scale of single atom and physics at ultra long-range length scales is treated at the same footing, bringing mesoscopic length scales within the realm of DFT calculations.

# MBI Interner Newsletter

12. Jahrgang - Ausgabe 41 - November 2020

**Termine - Save the date**

**Online/On site n.n.**

**Donnerstag, 22.04.2021**

Girls'Day

**Samstag, 5. Juni 2021**

Lange Nacht der Wissenschaften / Long Night of Sciences

**Donnerstag & Freitag, 30.9. & 1.10. 2021**

Wissenschaftlicher Beirat / SAB

Kein Herauskopieren, kein Vervielfältigungs- und Verbreitungsrecht der Bilder und Texte oder anderweitige Nutzung aus unserem MBI Internen Newsletter.

Copying, reproduction and distribution of any pictures or any other material of this Internal MBI Newsletter is prohibited.

**Bildnachweis Gymnastik (Gleichstellung): freepik**