

MBI Interner Newsletter

Inhalte

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

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,

eine Besucherin des MBI erzählte mir kürzlich nach einer Tour durch das Institut, wie erfrischend und stimulierend es gewesen sei, dass das Institut so international im Hinblick auf seine Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter ist. In der Tat sind wir mit Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern aus 32 Ländern und sehr diversen kulturellen Hintergründen breit aufgestellt. Für Neugierige hier der aktuelle Stand: Belarus, Belgien, Bosnien-Herzegowina, China, Dänemark, Deutschland, Frankreich, Großbritannien, Indien, Irak, Irland, Italien, Kanada, Kolumbien, Korea, Litauen, Mexiko, Niederlande, Norwegen, Pakistan, Portugal, Rumänien, Russland, Schweden, Spanien, Tunesien, Türkei, Ukraine, USA, Usbekistan, Venezuela, Vietnam.

Unser Anspruch ist es, Forschung sowie Entwicklung von Lasertechnologie auf international höchstem Niveau zu betreiben und so einen wichtigen Mehrwert in der deutschen Forschungslandschaft zu schaffen. Um hier erfolgreich zu sein, braucht es viele Dinge. Selbstverständlich sind z.B. akademische Freiheit, eine gute technische Infrastruktur und adäquate Finanzierung ganz wesentliche Komponenten. Am wichtigsten aber ist der Faktor Mensch! Die Kreativität und wissenschaftlich-technische Expertise der Forschenden sowie ihr Engagement für die wissenschaftliche Kultur am Institut ist essentiell. Ebenso wesentlich ist der Sachverstand und der Einsatz all unserer Mitarbeiter und Mitarbeiterinnen in den die Wissenschaft unterstützenden Bereichen, von der lokalen und gemeinsamen Verwaltung bis hin zur Haustechnik.

Ganz besonders im Wissenschaftsbereich, wo „Lehr- und Wanderjahre“ sowie internationaler Austausch üblich sind, profitieren wir davon, in der internationalen Community einen hervorragenden Ruf zu haben und unseren Forschenden exzellente Arbeitsbedingungen bieten zu können. Wie die 32 vertretenen Nationen zeigen, ziehen wir viele Wissenschaftler:innen auch aus dem Ausland an. Selbstverständlich ist es uns in allen Bereichen wichtig, ein attraktiver Arbeitgeber zu sein. Und ebenso selbstverständlich wollen wir niemanden ausschließen – nicht soziale, ethnische oder weltanschauliche Aspekte zählen, son-

Editorial

Dear members of MBI,

A visitor to MBI recently told me after a tour of the institute how refreshing and stimulating it had been to see that MBI is very international in terms of its staff. Indeed, with a staff from 32 countries a quite diverse cultural background is represented at the institute. For the curious, here is the current status: Belarus, Belgium, Bosnia-Herzegovina, China, Denmark, Germany, France, Great Britain, India, Iraq, Ireland, Italy, Canada, Colombia, Korea, Lithuania, Mexico, Netherlands, Norway, Pakistan, Portugal, Romania, Russia, Sweden, Spain, Tunisia, Turkey, Ukraine, USA, Uzbekistan, Venezuela, Vietnam.

We strive to conduct research as well as development of laser technology at the highest international level, thus providing important added value in the German research landscape. To be successful in this endeavor, many things are needed. Of course, academic freedom, a good technical infrastructure and adequate funding are essential components. Most important, however, is the human factor! The creativity and scientific-technical expertise of the researchers as well as their commitment to the scientific culture at the institute is essential. Equally essential is the expertise and dedication of all our staff in the areas that support science, from local and joint administration to building services.

Especially in the field of science, where high level „apprenticeships“ and international exchanges are common, we benefit from having an excellent reputation in the international community and from being able to offer our researchers excellent working conditions. As witnessed by the 32 nations represented in our staff, we attract many scientists from abroad. Of course, it is important for us to be an attractive employer in all areas. And just as naturally, we do not want to exclude anyone - it is not social, ethnic or ideological aspects that count, but professional competence and the ability to fit into the MBI team that are the decisive criteria.

The Executive Board of Forschungsverbund Berlin has committed itself to promoting a diversity-friendly and inclusive working environment in all FVB institutes. The fact that there

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

dern die fachliche Kompetenz und Passfähigkeit ins Team am MBI sind die entscheidenden Kriterien.

Der Vorstand des Forschungsverbundes Berlin hat sich dazu bekannt, in allen FVB-Instituten eine diversitätsfreundliches und inklusives Arbeitsumfeld zu fördern. Dass es keine Diskriminierung aufgrund von ethnischer Herkunft, Geschlecht, Religion und Weltanschauung, Behinderung, Alter oder sexueller Identität geben darf, leitet sich in Deutschland direkt aus dem Grundgesetz und dem Allgemeinen Gleichbehandlungsgesetz ab. Braucht es daher weitere Bekenntnisse und Zielsetzungen, wie z.B. in der Charta der Vielfalt? Ich denke gerade für uns als Forschungsinstitution ist es wichtig, sich zur Vielfalt in unserer Personalstruktur (in all den obengenannten „Dimensionen“) offen zu bekennen und diese weiter zu fördern, da wir in ganz besonderer Weise von einem unvoreingenommenen, offen, diskursivem Klima profitieren. Erfahrungen aus verschiedenen Blickwinkeln kombinieren zu können verhilft nicht nur in der Forschung oft zum Durchbruch – es macht das (Arbeits) Leben auch oft interessanter. Lassen Sie uns daher durch Respekt und Offenheit gegenüber unseren MBI Kolleg:innen und in Bewerbungsprozessen gemeinsam die Vielfalt am Institut ausbauen und nutzen! Dazu muss man sich hin und wieder an die eigene Nase fassen und fragen, ob man selbst (möglicherweise unbewusste) Vorurteile gegenüber bestimmten Personengruppen hat. Auf Ebene des Instituts gilt es, mögliche strukturelle Probleme zu identifizieren und zu beseitigen. Das MBI Direktorium wird sich weiterhin uneingeschränkt dafür einsetzen, dass jeder Mensch, der zur erfolgreichen Arbeit des Instituts beitragen kann, am MBI willkommen ist!

Für das Direktorium:
Stefan Eisebitt

must be no discrimination on the basis of ethnic origin, gender, religion and general beliefs, disability, age or sexual identity is derived directly from the Basic Law and the General Equal Treatment Act in Germany. Given this fact, do we need further commitments and goals, such as in the Charta der Vielfalt? In my view, especially for us as a research institution it is important to openly acknowledge and foster diversity in our personnel structure (in all the „dimensions“ mentioned above), as we very much benefit from an unbiased, open, discursive climate. Not only does the combination of experience from different perspectives facilitate breakthroughs in research - it also often makes (working) life more interesting. Together, let us expand and use the diversity at the institute, being respectful and open towards our MBI colleagues and applicants! For all of us, this does require some introspection now and then, checking for (possibly unconscious) bias against certain groups of people. At the level of the institute as an organization, it is important to identify and eliminate potential structural issues. The MBI Directorate is fully committed to ensuring that every person who can contribute to the successful work of the Institute is welcome at MBI!

For the Board of Directors:
Stefan Eisebitt

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Personalinformationen

Neue Mitarbeiter und Gäste des Max-Born-Instituts (Stand: 11.05.2022 - alphabetische Reihenfolge)

Name	Status	Abteilung	Telefon	E-Mail	Beginn
Brown, Graham Gardiner	wissenschaftlicher Mitarbeiter	T1	1239	brown@mbi-berlin.de	01.04.2022
Esnouf, Tancrede	Praktikant	A2	/	esnouf@mbi-berlin.de	25.04.2022
Gavrylov, Ilja	studentische Hilfskraft	A2	1251	gavrylov@mbi-berlin.de	01.04.2022
Jiménez De la Vega, Nayla E.	studentische Hilfskraft	A3	1243	jimnez@mbi-berlin.de	01.04.2022
Khodko, Alina	wissenschaftliche Mitarbeiterin	A2	1251	khodko@mbi-berlin.de	01.05.2022
Krishna, Jyoti	Gastwissenschaftlerin	T5	/	krishna@mbi-berlin.de	24.04.2022
Lund, Astrid Bratland	Praktikantin	T2	/	/	01.03.2022
Maier, Pablo Martin	studentische Hilfskraft	T2	1364	maier@mbi-berlin.de	01.04.2022
Nonbo, Joseph Christian	Masterstudent	A1	1257	nonbo@mbi-berlin.de	01.05.2022
Sneftrup, Peter Sørensen	Gastwissenschaftler	A1	1238	sneftrup@mbi-berlin.de	14.02.2022
Zülich, Ole	Bachelorstudent	B1	1370	zuelich@mbi-berlin.de	01.03.2022

Ausgeschiedene Mitarbeiter (Stand: 11.05.2022 - alphabetische Reihenfolge)

Andreev, Alexander	Gastwissenschaftler, B3
Davenport, Rebecca Ann	Projektmanagerin EU, B
Intravaia, Francesco	Gastwissenschaftler, T3
Ladwig, Mike	Techniker, Werkstatt
Poppe, Matthias	Techniker, Werkstatt
Ruberti, Marco	Gastwissenschaftler, T1
Schell, Felix	wissenschaftlicher Mitarbeiter, A 2
Singh, Nisha	Gastwissenschaftlerin, T5
Stammer, Philipp	Gastwissenschaftler, T1

Habilitationen/Abgeschlossene Dissertationen/Master- & Diplomarbeiten

F. Mahler

Ultraschnelle Ladungsträger- und Gitterdynamik in GaN- und GaAs-basierten Übergittern
Dissertation Humboldt-Universität zu Berlin (2021)

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Preis

Licht verdrehen, um Elektronen zu verdrehen - Olga Smirnova erhält ERC Advanced Grant für ihre Forschung zu ultraschneller molekularer Chiralität

Olga Smirnova hat einen renommierten Advanced Grant des Europäischen Forschungsrats (ERC) erhalten. Dieser fördert die Grundlagenforschung zur Entwicklung neuer Methoden zur Steuerung und Abbildung ultraschneller chiraler Dynamik auf einer Zeitskala von Attosekunden bis Femtosekunden über einen Zeitraum von 5 Jahren.

Der ERC Advanced Grant ist mit bis zu 2,5 Millionen Euro dotiert und wird an Spitzenforscherinnen und -forscher in Europa für bahnbrechende und risikoreiche Projekte in der Wissenschaft vergeben.

Chirale Moleküle liegen als nicht deckungsgleiche „Spiegelzwillinge“ in Paaren vor, die Enantiomere genannt werden. Die spezifischen Stereoanordnungen ihrer Kerne liegen ihren Schlüsselfunktionen in der Chemie und Biologie zugrunde. Und doch sind die chiralen molekularen Wechselwirkungen auf der Ebene der Elektronen, die auf ultraschnellen Zeitskalen stattfinden, noch wenig erforscht. Es ist eine noch ungelöste Aufgabe, extrem enantio-empfindliche, ultraschnelle und voll-optische Methoden zur Verfolgung der elektronischen Dynamik zu entwickeln. Das multidisziplinäre ULISSES-Projekt nimmt sich dieser Herausforderung an: Es macht sich die chiralen elektronischen Ströme zu Nutze, die auf natürliche Weise entstehen, wenn chirale Moleküle mit ausreichend intensivem Licht interagieren. Die chirale Natur dieser ultraschnellen Ströme wird durch das Molekül selbst bestimmt.

Das Projekt verwendet Licht mit räumlich und zeitlich strukturierter Polarisation, wodurch dieses Licht mit lokalen chiralen und globalen topologischen Eigenschaften ausgestattet ist. Durch die Steuerung des Lichts und der Elektronenströme, die es hervorruft, sollen neue optische Effekte erzeugt werden, die um Größenordnungen enantio-empfindlicher sind als die herkömmlichen optischen Techniken. Hierdurch ist es möglich, einen Zugang zu der ultraschnellen Elektronendynamik und den physikalischen Mechanismen zu gewinnen, die den chiralen Funktionen zugrunde liegen. Das Projekt wird auch einen Rahmen für die Beschreibung des geometrischen Magnetismus, erzeugt durch die Elektronenströme in den chiralen Molekülen, entwickeln und dank dieser geometrischen Konzepte neue Klassen enantio-empfindlicher Phänomene einführen.

Prize

Ultrafast molecular chirality: twisting light to twist Electrons – Olga Smirnova receives an ERC Advanced Grant



Olga Smirnova receives a prestigious Advanced Grant from the European Research Council (ERC) which supports, for a period of 5 years, basic research on developing new methods for controlling and imaging ultrafast chiral dynamics at attosecond to femtosecond time scale.

The ERC Advanced Grant is endowed with up to 2.5 million euro and awarded to top researchers in Europe pursuing groundbreaking high-risk projects in science.

Chiral molecules exist in pairs of non-superimposable “mirror twins” called enantiomers. The specific stereo arrangements of their nuclei underlie their key functions in chemistry and biology. Yet, little is known about chiral molecular interactions at the level of electrons, occurring on ultrafast time scales. Developing extremely enantio-sensitive, ultrafast and all-optical approaches to track electronic dynamics is an important unsolved challenge. The multidisciplinary project ULISSES aims to address this challenge by taking advantage of chiral electronic currents that arise naturally when chiral molecules interact with sufficiently intense light. The chiral nature of these ultrafast currents is dictated by the molecule itself.

The project will apply light with polarization structured both in space and in time, endowing such light with local chiral and global topological properties. By controlling the light and the electron currents it excites, the project aims to induce new optical effects which are orders of magnitude more enantio-sensitive than the traditional optical techniques, gaining access to the ultrafast electron dynamics and physical mechanisms underlying chiral functions. The project will also develop a framework for describing the geometrical magnetism, which is generated by the electron currents in chiral molecules, and introduce new classes of enantio-sensitive phenomena enabled by these geometric concepts.

By expanding our fundamental understanding of the dynamical response of chiral systems to light, ULISSES aims to set the grounds for innovative applications of all-optical methods to chiral discrimination in low-density samples with extraordinary sensitivity and molecular specificity.

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Mit einem erweiterten Verständnis der dynamischen Reaktion von chiralen Systemen auf Licht hat sich ULISSES das Ziel gesetzt, den Weg für innovative Anwendungen volloptischer Methoden zur chiralen Diskriminierung in Proben mit geringer Dichte mit außerordentlicher Empfindlichkeit und molekularer Spezifität zu ebnet.

Olga Smirnova leitet die Strong Field Theory Group am MBI und ist Professorin für Theoretische Physik an der TU Berlin. Mit ihrer Forschung zu Attosekunden- und Starkfeldphänomenen in Atomen, Molekülen und Systemen kondensierter Materie spielt sie weltweit eine führende Rolle in der Attosekunden- und Starkfeldphysik. Olga Smirnova hat mehrere Auszeichnungen für ihre wissenschaftliche Arbeit erhalten, darunter den Ahmed Zewail Award in Ultrafast Science and Technology der American Chemical Society im Jahr 2020.

Weitere Informationen zu Olga Smirnova sind verfügbar unter:

<https://mbi-berlin.de/p/olgasmirnova>
ERC Grants unter <https://erc.europa.eu>.

Kontakt: O. Smirnova, Tel. 1340

Olga Smirnova is a leader of the Strong Field Theory group at the MBI and is Professor of Theoretical Physics at Technische Universität Berlin. With her research on attosecond and strong field phenomena in atoms, molecules, and condensed matter systems, she plays a leading role in attosecond and strong field physics worldwide. Olga Smirnova has received several awards for her scientific work, among them the Ahmed Zewail Award in Ultrafast Science and Technology of the American Chemical Society in 2020.

Additional information about Olga Smirnova can be found at :

<https://mbi-berlin.de/p/olgasmirnova>
ERC Grants at <https://erc.europa.eu/>.

Contact: O. Smirnova, Tel. 1340

* * *



IOP Outstanding Reviewer Awards 2021 -

Guenter Steinmeyer

Each year outstanding reviewers are selected by IOPP's journal editors based on the quality, quantity, and timeliness of their reviews. From the more than 30,000 reviewers who have submitted reports to journals published by IOPP in 2021, 20 have received an Outstanding Reviewer of the Year Award. They are pleased to announce that Guenter Steinmeyer is one of the 2021 recipients of this recognition.

We congratulate!

Die Auszeichnung als herausragender Gutachter wird jährlich von den Herausgebern der IOP Publishing Group Zeitschriften verliehen, um die besten Gutachter für ihre herausragenden Bemühungen als Peer-Reviewer im letzten Jahr zu würdigen. Von den mehr als 30.000 Gutachtern, die im Jahr 2021 Gutachten bei Zeitschriften eingereicht haben, die von IOP im Jahr 2021 veröffentlicht wurden, haben 20 eine Auszeichnung als herausragender Gutachter des Jahres erhalten. Guenter Steinmeyer ist einer der Preisträger des Jahres 2021.

Wir gratulieren!

MBI Interner Newsletter

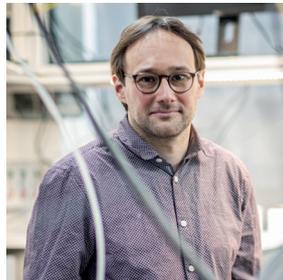
13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Jochen Mikosch erhält Professur an der Universität Kassel

Jochen Mikosch hat zum 1.5.2022 eine Heisenberg-Proessur für Experimentalphysik an der Universität Kassel angetreten und wird Teil des dort angesiedelten DFG Sonderforschungsbereich 1319 „Extremes Licht zur Analyse und Kontrolle molekularer Chiralität (ELCH)“.

Nach dem Studium der Physik in Freiburg, Heidelberg und Cambridge (England) hat Jochen Mikosch im Jahr 2008 seine Doktorarbeit bei Roland Wester in Freiburg verteidigt und war danach Postdoc bei Albert Stolow am Nationalen Forschungszentrum von Kanada (NRC) in Ottawa. Seit 2013 war er Gruppenleiter am MBI im Bereich A von Marc Vrakking und seit 2020 auch Koordinator für das Projekt 2.2 „Strong-field Few-body Physics“. Im Jahr 2020 hat er einen prestigeträchtigen Consolidator Grant des Europäischen Forschungsrats (ERC) gewonnen für zeitaufgelöste Strukturabbildungen der Dynamik chemischer Reaktionen.

Mit seiner Arbeitsgruppe in Kassel will er experimentelle Methoden aus dem hochaktuellen Forschungsgebiet der Attosekundenphysik auf spannende Fragestellungen im Grenzgebiet zwischen Physik, Chemie und Materialwissenschaften anwenden und dazu weiterhin mit dem MBI kooperieren.



Jochen Mikosch appointed Professor at the University of Kassel

Jochen Mikosch has started a Heisenberg professorship for experimental physics at the University of Kassel as of May 1st, 2022, where he is becoming part of the DFG collaborative research center 1319 'Extreme light for sensing and driving molecular chirality' (ELCH).

Following studies of Physics in Freiburg, Heidelberg and Cambridge (England) Jochen defended his PhD in 2008 in Freiburg under the supervision of Roland Wester and pursued a Postdoc with Albert Stolow at the National Research Council (NRC) of Canada in Ottawa. Since 2013 he was group leader at the Max-Born-Institute in division A headed by Marc Vrakking and since 2020 he was also coordinator of project 2.2 'Strong-field Few-body Physics'. In 2020 he won a prestigious Consolidator Grant of the European Research Council (ERC) for time-resolved studies of the structural dynamics of chemical reactions.

With his research group in Kassel he plans to apply experimental methods from attosecond physics to the crossroads of physics, chemistry and material science for which he intends to further collaborate with the MBI.

Benjamin Fingerhut erhält Professur an der Ludwig-Maximilians-Universität München

Benjamin Fingerhut ist ab Juni 2022 Professor für Theoretische Chemie an der Ludwig-Maximilians-Universität München (LMU).

Benjamin Fingerhut leitet die Theorienachwuchsgruppe für Biomolekulare Dynamik am MBI. 2011 verteidigte er seine Doktorarbeit bei Regina de Vivie-Riedle an der Ludwig-Maximilians-Universität München und schloss sich im Anschluss als Postdoc der Arbeitsgruppe von Shaul Mukamel an der University of California, Irvine (UCI) an.

Seit 2014 forscht er am MBI. Seine Forschungsschwerpunkte sind ultraschnelle Phänomene an biologischen Grenzflächen und die Entwicklung effizienter numerischer Methoden zur Beschreibung von dissipativer Quantendynamik in kondensierter Phase. Benjamins Forschung wird durch einen Starting Grant des Europäischen Forschungsrats unterstützt, und er ist Empfänger des Robin Hochstrasser Young Investigator Award und des Coblentz Award.



Benjamin Fingerhut appointed Professor at the Ludwig-Maximilians-Universität München

Benjamin Fingerhut is heading the Biomolecular Dynamics theory group at the Max Born Institute. He received a Dr. rer. nat. degree from the Ludwig-Maximilians-Universität München in 2011 (Doctoral supervisor: Regina de Vivie-Riedle) and afterwards joined as a postdoctoral fellow the group of Shaul Mukamel at the University of California, Irvine (UCI).

He joined the Max Born Institute in 2014. Benjamin's research focuses on ultrafast phenomena at biological interfaces and the development of efficient numerical methods for the description of condensed-phase dissipative quantum dynamics. Benjamin's research is supported by a starting grant of the European Research Council, and he is a recipient of the Robin Hochstrasser Young Investigator Award and the Coblentz Award.

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Betriebsrat

Liebe Kolleginnen und Kollegen,

am 30. März 2022 fanden die Betriebsratswahlen im Max-Born-Institut statt. Über das Wahlergebnis wurden Sie zwischenzeitlich vom Wahlleiter Dr. Daniel Schick per E-Mail und per Aushang informiert. Wir danken dem Wahlvorstand, dem neben Daniel Schick, Janett Feickert und Johann Frank angehörten, für die reibungslose Organisation und Durchführung der Wahl. Ebenso Katrin Herrmann, Dimitra Zimani, Wolfgang Krüger, Michael Pankow sowie Ulrike Hanke und Jan Brederock gilt unser Dank dafür, dass sie die BR-Wahl tatkräftig unterstützt haben.

Ein Gewählter nahm sein Mandat nicht an, so dass ich, Peter Scholze, als erstes Ersatzmitglied in den Betriebsrat aufrückte. Deshalb ergeben sich in der personellen Zusammensetzung des Gremiums keine Änderungen im Vergleich zur vorherigen Amtsperiode. Die nun vor uns liegende 4-jährige Amtsperiode wird bis zum Frühjahr 2026 andauern.

Auch im neuen Betriebsrat sind alle Beschäftigtengruppen des Instituts repräsentiert. Mit Dr. Tobias Witting (A2) und Dr. Johannes Tümmler (B3) verfügen wir über zwei Wissenschaftler in unseren Reihen. Die Verwaltung ist mit Jeannine Rehse als Personalsachbearbeiterin und Bibliothekarin (Vw/ Bibl) und Sabine Schütz (Vw), zuständig für technisches Gebäudemanagement und Einkauf, vertreten. Gerd Kommol (B3), Thomas Müller (Werkstatt) und ich, Peter Scholze (C1), sind technische Mitarbeiter. Außerdem möchte ich gerne Michael Pankow (Betriebstechnik) nennen, da er als nunmehr 1. Ersatzmitglied recht häufig in die BR-Arbeit einbezogen sein wird.

In der konstituierenden Sitzung, die vom Vorsitzenden des Wahlvorstandes Daniel Schick einberufen und geleitet wurde, wurde Tobias Witting zum BR-Vorsitzenden und Gerd Kommol zu seinem Stellvertreter gewählt. Sabine Schütz, Jeannine Rehse und ich wurden als Schriftführer gewählt und werden künftig im Wechsel die Sitzungsprotokolle erstellen. Thomas Müller wurde als Vertreter des Betriebsrats in den Arbeitsschutzausschuss (ASA) gewählt. Gerd Kommol und ich wurden als Vertreter des MBI-Betriebsrats in den Gesamtbetriebsrat (GBR) des Forschungsverbundes Berlin e.V. entsandt.

Wir als Ihr Betriebsrat freuen uns auf die Zusammenarbeit in den kommenden vier Jahren. Die effektive Vertretung der Belegschaftsinteressen wird unser Anspruch und unsere Verantwortung sein. Bitte scheuen Sie sich nicht, uns für Ihre Anliegen in Anspruch zu nehmen. Sprechen Sie uns an, denn nur so können wir für Sie aktiv werden.

Works Council

Dear colleagues,

the works council election at MBI took place on March, the 30th. In the meantime the election coordinator Daniel Schick sent an e-mail about the election results which you also find on the notice boards in every house. We would like to express our thanks to the electoral board, which included Daniel Schick, Janett Feickert, and Johann Frank, for the entire organization and conduct of the election. We thank as well Katrin Herrmann, Dimitra Zimani, Wolfgang Krüger, Michael Pankow, Ulrike Hanke, and Jan Brederock for their great support during the works council election.

One of the elected staff members did not accept his mandate, so I myself, Peter Scholze, moved up from first substitute to full member of the works council. Therefore, there are no changes in the composition of the new works council compared to the previous term of office. The four-year term of office that is now ahead of us will last until spring 2026.

All employee groups of the institute are also represented in the new works council. With Dr. Tobias Witting (A2) and Dr. Johannes Tümmler (B3) we have two scientists in our ranks. Jeannine Rehse, our human resources and librarian (Vw/Bibl) and Sabine Schütz (Vw), responsible for technical building management and procurement are representing the administration. Representatives of the technical divisions are Gerd Kommol (B3), Thomas Müller (workshop) and myself, Peter Scholze (C1), technical staff. Furthermore, I would also like to mention Michael Pankow (operational engineering), since he will be regularly involved in the works council as he is the 1st substitute member.

During the constituent meeting which was convened by the election coordinator Daniel Schick, Tobias Witting was elected as new chairman of the works council and Gerd Kommol as the new deputy chair. Sabine Schütz, Jeannine Rehse and myself, Peter Scholze, are secretaries of the council and will take turns in writing the meeting minutes. Thomas Müller was elected as representative in the health and safety committee (ASA). Gerd Kommol and myself, Peter Scholze, represent the MBI works council in the General Works Council of the Forschungsverbund (GBR).

As your newly formed works council, we look forward to working together over the next four years.

The effective representation of all staff's interests will be our aim and our responsibility. Please do not hesitate to talk about your concerns and approach us at any time, because this is the only way we can take action on your behalf.

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Unsere E-Mail-Adresse lautet mbi-betriebsrat@mbi-berlin.de.
Ergänzend finden Sie auf der Intranetsite <https://internal.mbi-berlin.de/de/de/arbeiten-am-mbi/betriebsrat/uebersicht> neben den Kontaktdaten der BR-Mitglieder viele weitere nützliche Informationen wie zum Beispiel die im Institut geltenden Betriebsvereinbarungen.

Viele Grüße im Namen des Betriebsrates
Peter Scholze

Our e-mail address is mbi-betriebsrat@mbi-berlin.de.
In addition, you will find a lot of other useful information on the intranet site <https://internal.mbi-berlin.de/de/de/arbeiten-am-mbi/betriebsrat/uebersicht> in addition to the contact details of the BR members, such as the institutional work agreement.

For the Works Council
Peter Scholze

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Gleichstellung

Equal Opportunity

Girls' Day 2022 am 28.04.2022

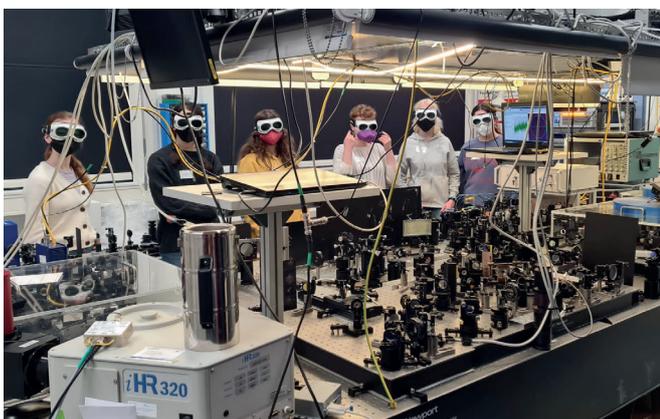
Girls' Day 2022 on 28.04.2022



Herzlichen Dank an alle, die beim Girls' Day mit anpackten und mit Herzblut und Engagement diesen Aktionstag nach zwei Jahren wieder möglich und zu einem Erlebnis gemacht haben. Das Feedback der Schülerinnen war sehr positiv.

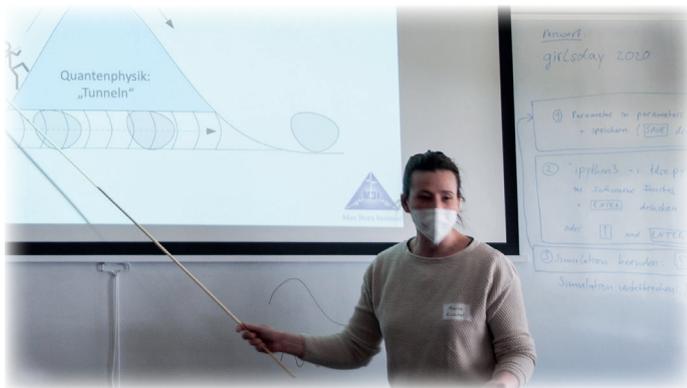
Mir hat besonders das 3. Experiment gefallen. Aber die anderen beiden waren auch toll. Außerdem habe ich gemerkt das es viel mehr Spaß gemacht als in der Schule obwohl es Physik war.

Mir hat alles sehr viel Spaß gemacht. Die verschiedenen Experimente haben mir sehr gut gefallen und auch die Arbeit mit den Lasern im Labor fand ich interessant. Die Quantenphysik war etwas kompliziert, aber trotzdem gut erklärt. Die Mittagspause hat mir sehr gut gefallen. Es war für jeden etwas dabei. Den Tag fand ich super und es hat mir deutlich besser gefallen, als der Physik Unterricht in der Schule.



MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022



... und fleißig selber ausprobiert. Was gar nicht so leicht war.



Es wurde aufgepasst und fein mitgeschrieben ...



MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Projekteinwerbungen

Bereich A

Projektbezeichnung: NI 492/13-2

Fortgeschrittene experimentelle und numerische Methoden für die Charakterisierung von ultrakurzen Laserpulsen

Laufzeit: 01.02.22-30.04.2025

Projektleiter: M. Jasiulek

Geldgeber: DFG

Bereich C

Projektbezeichnung: JA 3253/2-1

Femtosekundenspektroskopie und quantenchemische Molekulardynamiksimulationen von photoinduzierten Protonentransfer-Prozessen in wässriger Lösung

Laufzeit: 01.03.2022-31.03.2025

Projektleiter: E. T. J. Nibbering

Geldgeber: DFG

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Forschungsergebnisse

Attosekunden-Laserpulse: 100-fach

Attosekunden-Laserpulse im extremen Ultraviolett (XUV) sind ein einzigartiges Werkzeug zur Beobachtung und Steuerung der Elektronendynamik in Atomen, Molekülen und Festkörpern. Die meisten Attosekunden-Laserquellen arbeiten mit einer Pulswiederholrate von 1 kHz (1000 Pulse pro Sekunde), was ihren Einsatz für komplexe Experimente einschränkt. Mit einem am MBI entwickelten Hochleistungslasersystem ist es uns gelungen, Attosekundenpulse mit einer Wiederholrate von 100 kHz zu erzeugen. Dies ermöglicht neuartige Experimente in der Attosekundenforschung.

Lichtpulse im extrem ultravioletten (XUV) Bereich des elektromagnetischen Spektrums mit einer Dauer in der Größenordnung von 100 Attosekunden ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) ermöglichen es Wissenschaftlern, die ultraschnelle Dynamik von Elektronen in Atomen, Molekülen und Festkörpern zu untersuchen. In der Regel werden die Experimente mit einer Sequenz von zwei Laserpulsen mit kontrollierbarer Zeitverzögerung durchgeführt. Der erste Puls regt das System an, und der zweite Puls macht eine Momentaufnahme des sich entwickelnden angeregten Systems, indem er eine geeignete Messgröße aufzeichnet. Üblicherweise werden die Impulsverteilungen von Ionen oder Elektronen oder das transiente Absorptionsspektrum des XUV-Pulses als Funktion der Verzögerung zwischen den beiden Pulsen gemessen. Durch Wiederholung des Experiments für verschiedene Zeitabstände zwischen den beiden Pulsen kann ein Film der untersuchten Dynamik erstellt werden.

Um möglichst detaillierte Einblicke in die Dynamik des untersuchten Systems zu erhalten, ist es von Vorteil, die verfügbaren Informationen über die zeitliche Entwicklung möglichst vollständig zu messen. Bei Experimenten mit atomaren und molekularen Targets kann es von Vorteil sein, die dreidimensionalen Impulse aller geladenen Teilchen zu messen. Dies kann mit einem so genannten Reaktionsmikroskop (REMI) erreicht werden, indem Elektronen und Ionen in Koinzidenz nachgewiesen werden. Um das zu erreichen, muss sichergestellt werden, dass bei jedem Laserpuls nur eine einzelne Ionisation stattfindet. Dies hat jedoch zur Folge, dass die Nachweisrate auf einen Bruchteil (in der Regel 10 bis 20%) der Pulswiederholrate des Lasers begrenzt ist. Aussagekräftige Pump-Probe-Experimente in einem REMI sind daher mit Attosekunden-Pulsquellen der 1-kHz-Klasse nur begrenzt möglich.

Am MBI haben wir ein Lasersystem entwickelt, das auf optischer parametrischer gechirpter Impulsverstärkung (Englisch: optical parametric chirped pulse amplification (OPCPA)) basiert. Bei der parametrischen Verstärkung wird keine Energie im Verstärkermedium gespeichert, daher wird nur sehr wenig

Research Highlights

Attosecond pulses: 100 times more

Attosecond laser pulses in the extreme ultraviolet (XUV) are a unique tool enabling the observation and control of electron dynamics in atoms, molecules, and solids. Most attosecond laser sources operate at a pulse repetition rate of 1 kHz (1000 shots per second), which limits their usefulness in complex experiments. Using a high power laser system developed at MBI we have managed to generate attosecond pulses at 100 kHz repetition rate. This enables new types of experiments in attosecond science.

Light pulses in the extreme ultraviolet (XUV) region of the electromagnetic spectrum, with durations on the order of 100s of attoseconds ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) allow scientists to study ultrafast dynamics of electrons in atoms, molecules and solids. Usually experiments are performed using a sequence of two laser pulses with a controllable time-delay between them. The first pulse excites the system, and the second pulse takes a snapshot of the evolving system, by recording an appropriate observable. Usually the momentum distributions of ions or electrons or the transient absorption spectrum of the XUV pulse is measured as a function of delay between the two pulses. By repeating the experiment for different timings between the two pulses a movie of the dynamics under study can be created.

In order to get most detailed insights into the dynamics of the system under investigation, it is advantageous to measure the available information about the time evolution as completely as possible. In experiments with atomic and molecular targets, it can be advantageous to measure the three-dimensional momenta of all charged particles. This can be achieved with a so-called reaction microscope (REMI) apparatus. The scheme works by ensuring single ionization events for every laser shot and detecting electrons and ions in coincidence. This however, has the drawback, that the detection rate is limited to a fraction (usually 10 to 20%) of the laser pulse repetition rate. Meaningful pump-probe experiments in a REMI are not possible with 1 kHz class attosecond pulse sources.

At MBI we have developed a laser system based on optical parametric chirped pulse amplification (OPCPA). In parametric amplification no energy is stored inside the amplification medium, therefore very little heat is generated. This enables the amplification of laser pulses to much higher average powers than with the current "work-horse" Ti:Sapphire laser, which is most often used in attosecond laboratories around the world. The second advantage of OPCPA technology is the ability to amplify very broad spectra. Our OPCPA laser system directly amplifies few-cycle laser pulses with durations of 7 fs

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Wärme erzeugt. Dies ermöglicht die Verstärkung von Laserpulsen auf wesentlich höhere Durchschnittsleistungen als mit dem derzeitigen „Arbeitspferd“, dem Titan:Saphir-Laser, der in Attosekunden-Laboratorien auf der ganzen Welt am häufigsten eingesetzt wird. Der zweite Vorteil der OPCPA-Technologie ist die Fähigkeit, sehr breite Spektren zu verstärken. Unser OPCPA-Lasersystem verstärkt direkt Laserpulse mit wenigen Zyklen und einer Dauer von 7 fs auf eine mittlere Leistung von 20 W. Dies entspricht einer Pulsenergie von 200 μ J bei 100 kHz Wiederholrate. Mit diesem Lasersystem haben wir bereits erfolgreich Attosekunden-Pulszüge (Englisch: attosecond pulse trains (APT)) erzeugt [1].

Bei vielen Attosekunden-Experimenten ist es von Vorteil, isolierte Attosekundenpulse anstelle eines Pulszugs aus mehreren Attosekundenpulsen einzusetzen. Um die effiziente Erzeugung isolierter Attosekundenpulse zu ermöglichen, sollten die Laserpulse, die den Erzeugungsprozess antreiben, eine Pulsdauer haben, die so nah wie möglich an einem einzigen Lichtzyklus liegt. Auf diese Weise ist die Emission der Attosekundenpulse auf einen einzigen Zeitpunkt beschränkt, was zu isolierten Attosekundenpulsen führt. Um Laserpulse mit Pulsdauern nahe an einem einzigen Zyklus zu erhalten, haben wir die Hohlfaserpulskompressionstechnik eingesetzt. Die 7 fs-Pulse werden in eine 1 m langen Hohlfaserkapillare eingekoppelt. Diese Kapillare ist zur spektralen Verbreiterung mit Neongas gefüllt. Mit Hilfe speziell entwickelter 'gechirpter' dielektrischer Spiegel können die Pulse auf Pulsdauern von nur 3,3 fs komprimiert werden. Bei der benutzten Wellenlänge von 800 nm haben diese Pulse nur 1,3 optische Zyklen.

Die 1,3-Zyklus-Pulse werden in eine am MBI entwickelte Attosekunden-Beamline eingespeist. Der Hauptteil der Energie wird zur Erzeugung isolierter Attosekunden-XUV-Pulse in einem Gaszellentarget verwendet. Nach Entfernung des Hochleistungs-NIR-Strahls, spektraler Filterung und Fokussierung stehen etwa 10^6 Photonen pro Laserschuss (entsprechend einem beispiellosen Photonenfluss von 10^{11} Photonen pro Sekunde) für Experimente zur Verfügung.

Um die erzeugten Attosekunden-XUV-Pulse zu charakterisieren, haben wir ein Attosekunden 'Streaking'-Experiment durchgeführt. Im Wesentlichen wird der XUV-Puls verwendet, um ein atomares Gasmedium (in unserem Fall Neon) zu ionisieren, während ein starker NIR-Puls verwendet wird, um die mit dem XUV Licht erzeugten Photoelektronenwellenpakete zu modulieren. Je nach dem genauen Timing der XUV- und NIR-Pulse werden die Photoelektronen beschleunigt (gewinnen Energie) oder abgebremst (verlieren Energie), was zu einem charakteristischen 'Streaking'-Spektrogramm führt. Aus dieser Datenmatrix lassen sich die genauen Formen sowohl des NIR-Pulses als auch des XUV-Pulses bestimmen. Die Attosekunden-Pulsformen wurden mithilfe eines für dieses Projekt entwickelten

to average powers of 20 W. This is a pulse energy of 200 μ J at 100 kHz repetition rate. With this laser system we have previously successfully generated attosecond pulse trains [1].

In many attosecond experiments it is beneficial to have isolated attosecond pulses instead of a train of multiple attosecond pulses. To enable the efficient generation of isolated attosecond pulses, the laser pulses driving the generation process should have pulse durations as close as possible to a single cycle of light. This way the attosecond pulse emission is confined to one point in time leading to isolated attosecond pulses. In order to achieve near-single-cycle laser pulses we have employed the hollow fiber pulse compression technique. The 7 fs pulses are sent through a 1m long hollow waveguide filled with neon gas for spectral broadening. Using specially designed chirped mirrors the pulses can be compressed to pulse durations as short as 3.3 fs. These pulses consist of only 1.3 optical cycles.

The 1.3 cycle pulses are sent into an attosecond beamline developed at the MBI. The main part of the energy is used to generate isolated attosecond XUV pulses in a gas cell target. After removal of the high power NIR beam, spectral filtering, and focussing, around 10^6 photons per laser shot (corresponding to an unprecedented photon flux of 10^{11} photons per second) are available for experiments.

In order to characterize the generated attosecond XUV pulses we performed an attosecond streaking experiment. Essentially the XUV pulse is used to ionize an atomic gas medium (neon in our case), while a strong NIR pulse is used to modulate the XUV generated photoelectron wavepackets. Dependent on the exact timing of the XUV and NIR pulses, the photoelectrons are accelerated (gain energy) or decelerated (lose energy) leading to a characteristic 'streaking trace'. From this datamatrix the exact shapes of both the NIR pulse, as well as the XUV pulse can be determined. The attosecond pulse shapes have been retrieved using a global optimization algorithm developed pulses have a duration of 124 ± 3 as. The main pulse is accompanied by two adjacent satellite pulses. These stem from the attosecond pulse generation half an NIR cycle before and after the main attosecond pulse generation. The pre- and post-pulse satellites have a relative intensity of only 1×10^{-3} and 6×10^{-4} , respectively.

These high flux isolated attosecond pulses open the door for attosecond pump-probe spectroscopy studies at a repetition rate 1 or 2 orders of magnitude above current implementations. We are currently starting experiments with these pulses in a reaction microscope (REMI).

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

globalen Optimierungsalgorithmus ermittelt. Unsere sorgfältige Analyse zeigt, dass die Hauptpulse der erzeugten XUV Attosekundenpulse eine Dauer von 124 ± 3 as haben. Der Hauptpuls wird von zwei benachbarten Satellitenpulsen begleitet. Diese stammen von der Attosekundenpuls-Erzeugung einen halben NIR-Zyklus vor und nach der Haupt-Attosekundenpuls-Erzeugung. Die Satellitenpulse vor und nach dem Hauptpuls haben eine relative Intensität von nur 1×10^{-3} bzw. 6×10^{-4} .

Diese isolierten Attosekundenpulse mit hohem Photonenfluss ermöglichen Attosekunden-Pump-Probe-Spektroskopie-Studien mit einer Wiederholrate, die um 1 oder 2 Größenordnungen über derzeitigen Implementierungen liegt. Wir beginnen derzeit Experimente mit diesen Pulsen in einem Reaktionsmikroskop (REMI).

Original publications:

[1] Generation and Characterisation of Few-Pulse Attosecond Pulse Trains at 100 KHz Repetition Rate

Mikhail Osolodkov, Federico J. Furch, Felix Schell, Peter Šušnjar, Fabio Cavalcante, Carmen S. Menoni, Claus P. Schulz, Tobias Witting, and Marc J. J. Vrakking

Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics 53, no. 19 (September 2020): 194003

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6455/aba77d>

[2] Generation and characterization of isolated attosecond pulses at 100 kHz repetition rate

Tobias Witting, Mikhail Osolodkov, Felix Schell, Felipe Morales, Serguei Patchkovskii, Peter Šušnjar, Fabio H. M. Cavalcante, Carmen S. Menoni, Claus P. Schulz, Federico J. Furch, Marc J. J. Vrakking

Optica 9, 145-151 (2022)

<https://opg.optica.org/optica/fulltext.cfm?uri=optica-9-2-145&id=468825>

Contact: T. Witting, Tel. 1228, F. Furch, Tel. 1277

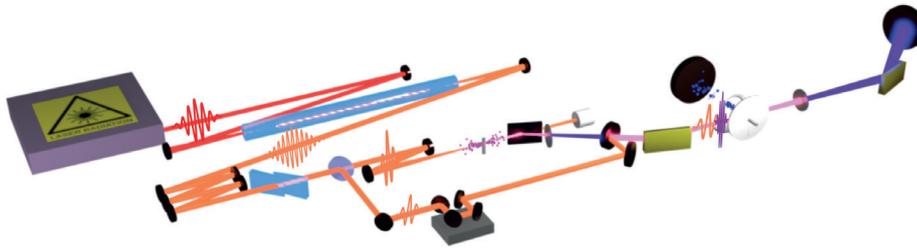


Abb. 1.

Experimenteller Aufbau. Unser selbstentwickeltes OPCPA-System liefert 7 fs-Pulse mit 100 kHz Wiederholrate. Diese Pulse werden durch Hohlfaserpulscompression auf 3,3 fs Dauer verkürzt. Attosekunden-Streaking-Experimente werden in einer eigens dafür gebauten Beamline durchgeführt.

Fig. 2:

Experimental setup. Our home-built OPCPA system provides 7fs pulses at 100 kHz repetition rate. These pulses are shortened to 3.3 fs duration via hollow fiber pulse compression. Attosecond streaking experiments are performed in a purpose-built beamline.

Abb. 2.

Ergebnisse des Attosekunden-Streakings.

(a) Gemessene Photoelektronenspektren als Funktion der Verzögerung zwischen XUV und IR Puls. (b) Intensitätseinhüllende des isolierten Attosekundenpulses (Einsatz: Intensitätsprofil mit logarithmischer Intensitätskala) (c) Ermittelte spektrale Intensität und spektrale Phase.

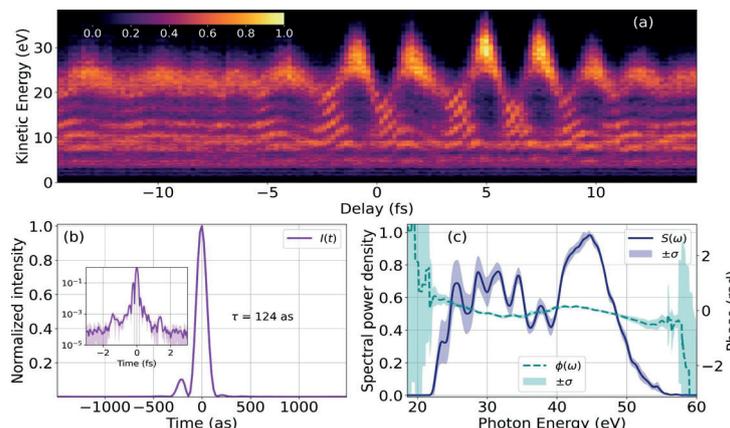


Fig. 2.

Attosecond streaking results.

(a) Measured photoelectron streaking trace. (b) Intensity envelope of retrieved isolated attosecond pulse (inset: the intensity profile on logarithmic scale) (c) Retrieved spectral intensity and spectral phase.

Forschungsergebnisse

Ein ultraschneller Röntgenblick in die elektronische Struktur von Photosäuren

Photosäuren sind Moleküle, die nach elektronischer Anregung ein Proton freisetzen und so den Säuregrad einer Flüssigkeit erhöhen. Die Pionierarbeit von Theodor Förster hat für solche Moleküle die direkte Beziehung zwischen der Wellenlänge der optischen Absorption und den Säureeigenschaften aufgezeigt, mit der die Erhöhung des Säuregrades im ersten elektronisch angeregten Zustand quantifiziert werden kann. Zugrundeliegende vollständige Beschreibungen der mikroskopischen Effekte die das Photosäure-Phänomen erklären sind jedoch seither spärlich geblieben. Ultraschnelle Röntgenspektroskopie, bei der die elektronische Struktur einer protonenliefernden Gruppe einer aromatischen Amin-Photosäure lokal untersucht wird, hat nun einen direkten Einblick in die Veränderungen der elektronischen Struktur ermöglicht. Die seit langem offene Frage nach der Photoazidität ist nun endlich geklärt: Die wichtigsten elektronischen Strukturänderungen finden auf der Basenseite des sogenannten Förster-Zyklus statt, während die Säureseite eine untergeordnete Rolle spielt.

Photosäuren sind seit mehr als 70 Jahren bekannt. Theodor Förster war der erste, der die Beobachtungen der Absorptions- und Fluoreszenzspektren von Photosäuren korrekt beschrieb und die Positionen der elektronischen Übergänge, die zu optischen Absorptionsbanden führen, mit den erhöhten Säureeigenschaften von Photosäuren im elektronisch angeregten Zustand in Verbindung brachte. In den folgenden Jahrzehnten wurden zahlreiche Forschungsarbeiten durchgeführt, doch abgesehen von quantenchemischen Berechnungen von Photosäuremolekülen mittlerer Größe, die sich auf die intramolekularen elektronischen Ladungsverteilungsänderungen der protonenliefernden Anteile von Fotosäuren konzentrierten, blieben die mikroskopischen Erkenntnisse begrenzt. Einige dieser Studien haben - in Übereinstimmung mit früheren Vorschlägen, die auf physikalisch-organischen Prinzipien beruhen - gezeigt, dass die Auswirkungen der elektronischen Anregung auf der konjugierten Photobasenseite des Förster-Zyklus viel ausgeprägter sind (Abb. 1).

Wissenschaftler des MBI, der Universität Stockholm, der Universität Hamburg, des Helmholtz-Zentrums Berlin, der Ben-Gurion Universität des Negev in Beersheva und der Universität Uppsala haben nun erfolgreich einen neuartigen kombinierten experimentellen und theoretischen Ansatz verfolgt, um die elektronischen Ladungsverteilungen von Photosäuren entlang der vier Stadien der Photosäuren zu untersuchen, die einen direkten mikroskopischen Einblick in die elektronischen Strukturänderungen der protonenspendenden Aminogruppe eines Aminopyren-Derivats in wässriger Lösung ermöglichen. Die K-Kanten-Röntgenabsorptionsspektren der Stickstoffatome

Research Highlights

An ultrafast X-ray glance into photoacid electronic structure

Photoacids are molecules that release a proton upon electronic excitation, thus enhancing the acidity of a liquid. Pioneering work by Theodor Förster has shown the direct relationship between the wavelength position of optical absorption and acidity properties with which the increase in acidity in the first electronic excited state can be quantified. However, underlying full microscopic explanations for the photoacidity phenomenon have remained sparse. With ultrafast X-ray spectroscopy, locally probing the electronic structure of a proton donating group of an amine aromatic photoacid has now provided direct insight in the changes of electronic structure. The long standing open question for photoacidity has now finally been resolved: major electronic structure changes occur on the base side of the so-called Förster cycle, whereas the acid side plays a minor role.

Photoacids have been known for more than 70 years. Theodor Förster has been the first to correctly describe the observations of absorption and fluorescence spectra of photoacids, and connect positions of the electronic transitions giving rise to optical absorption bands to the increased acidity properties of photoacids in the electronic excited state. Many research activities have been pursued in the following decades, but apart from quantum chemical calculations of photoacid molecules of medium size, focussing on the intramolecular electronic charge distribution changes of the proton donating moieties of photoacids, microscopic insight have remained limited. Some of these studies have indicated – in line with previous suggestions based on physical organic principles – that the effects of electronic excitation are much more pronounced on the conjugate photobase side of the Förster cycle (Fig. 1).

Scientists from the MBI, Stockholm University, the University of Hamburg, Helmholtz-Zentrum Berlin, Ben-Gurion University of the Negev in Beersheva and Uppsala University, have now successfully pursued a novel combined experimental and theoretical approach to study the electronic charge distributions of photoacids along the four stages of photoacids provide direct microscopic insight into the electronic structural changes of the proton donating amine group of an aminopyrene derivative in aqueous solution. The K-edge X-ray absorption spectra of nitrogen atoms in the molecular structure were measured at the synchrotron BESSY II in transmission mode to locally probe electronic structure on ultrafast time scales. Together with quantum chemical calculations, such results provide a consistent picture of photoacid behaviour (Fig. 2): electronic charge distributions of the proton donating group are only minor on the photoacid side, but substantial on the conjugate photobase side. Yet the overall dipole moment change of the whole molecule is as important as the local charge distribution

des Moleküls wurden am Synchrotron BESSY II im Transmissionsmodus gemessen, um die elektronische Struktur auf ultrakurzen Zeitskalen lokal zu untersuchen. Zusammen mit quantenchemischen Berechnungen ergeben diese Ergebnisse ein konsistentes Bild des Photosäureverhaltens, die in Abb. 2 dargestellt sind: Die Änderung der elektronischen Ladungsverteilungen der protonenspendenden Gruppe im angeregten Zustand sind auf der Photosäureseite nur gering, wobei sie auf der konjugierten Photobasenseite erheblich stärker ausfallen. Die Änderung des Gesamtdipolmoments des gesamten Moleküls ist jedoch ebenso wichtig wie die Änderungen der lokalen Ladungsverteilung, so dass die Solvatationsdynamik durch das Lösungsmittel Wasser der zweite wichtige Faktor ist, der die Stärke einer Photosäure bestimmt.

changes, hence solvation dynamics by the solvent water is the second important factor governing photoacidity.

Original publication:

Electronic Structure Changes of an Aromatic Amine Photoacid along the Förster Cycle

Sebastian Eckert, Marc-Oliver Winghart, Carlo Kleine, Ambar Banerjee, Maria Ekimova, Jan Ludwig, Jessica Harich, Mattis Fondell, Rolf Mitzner, Ehud Pines, Nils Huse, Philippe Wernet, Michael Odelius, and Erik T. J. Nibbering
 Angew. Chem. Int. Ed. 2022, e202200709
<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/anie.202200709>

Contact: Erik T. J. Nibbering, Tel. 1477, Marc-Oliver Winghart, Tel. 1496,

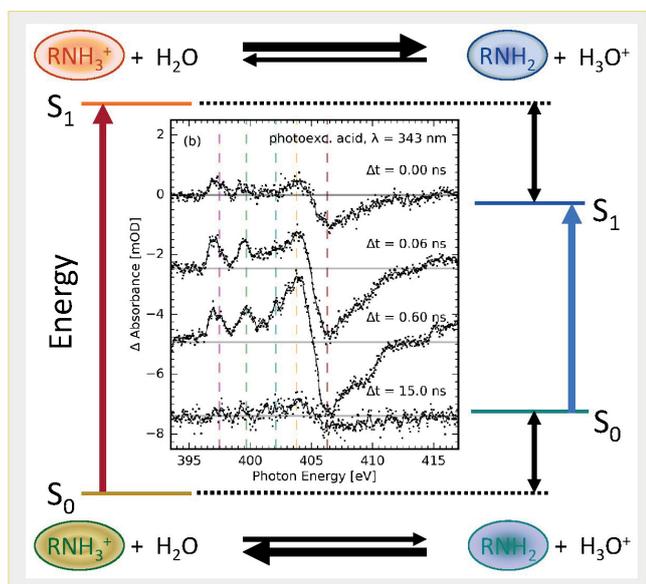


Fig. 1: Förster-Zyklus einer Amin-Photosäure mit den elektronischen Grundzuständen S_0 und den ersten angeregten Zuständen S_1 der sauren (links) und basischen (rechts) Spezies. Die vier Stadien des Photosäureverhaltens in wässriger Lösung sind schematisch dargestellt. In der Mitte sind transiente Weichröntgenspektren dargestellt, die an 8-Aminopyren-1,3,6-trisulfonat (APTS) gemessen wurden.

Fig. 1: Förster cycle of an amine photoacid, showing electronic ground states S_0 and the first excited states S_1 of the acidic (left) and basic (right) species. There are the four stages of photoacid behaviour in aqueous solution, as shown by the cartoons. In the centre transient soft-X-ray spectra are shown, measured on 8-aminopyrene-1,3,6-trisulfonate (APTS).

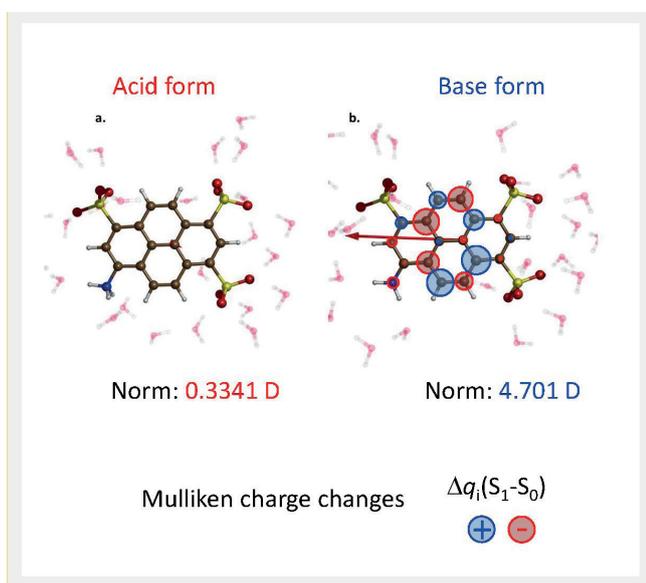


Fig. 2: Simulierte Änderungen der Ladungsverteilung der APTS-Photosäure und der konjugierten Photobase, die in Änderungen der Mulliken-Ladungen und des elektrischen Dipolmoments bei elektronischer Anregung resultieren.

Fig. 2: Estimated charge distribution changes on the APTS photoacid and conjugate photobase forms, showing major changes in Mulliken charges and in the electric dipole moment upon electronic excitation.

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Forschungsergebnisse

Beschleunigung der Schreib-/Löschzyklen bei der optischen Magnetisierungsumschaltung

Magnetische Bits zur Datenspeicherung lassen sich – anstatt wie üblich mit Magnetfeldern aus Schreibköpfen – auch durch ultraschnelle Laserpulse umschalten. Forschende des MBI und der FU Berlin haben nun einen Weg gefunden, die zum Hin- und Herschalten eines Bits grundsätzlich erforderliche Zeit auf einen Rekordwert von nur sieben Pikosekunden zu verkürzen.

Nach einer Schätzung von IBM übersteigt die derzeitige Tagesproduktion digitaler Informationsbytes 2,5 Quintillionen (entspricht etwa 50 Millionen zweischichtigen Blu-ray-Discs, die übereinander gestapelt 60 km hoch wären) und wächst weiterhin in atemberaubendem Tempo. Die überwiegende Mehrheit dieser Daten wird magnetisch gespeichert, wobei ein binäres Bit, 0 oder 1, einer entgegengesetzten Magnetisierungsrichtung entspricht, und heutzutage üblicherweise durch einen Elektromagneten geschrieben oder gelöscht wird. Da dieses Verfahren in Bezug auf Geschwindigkeit und Energieeffizienz grundlegende Beschränkungen aufweist, wird die Entdeckung des rein optischen Schaltens (all optical switching, AOS), das es ermöglicht ein magnetisches Bit nur mit Hilfe von Lichtpulsen zu schreiben oder zu löschen, als vielversprechender neuer Ansatz für die künftige Datenspeichertechnologie betrachtet. AOS wurde bereits in verschiedenen magnetischen Materialien bestehend aus einem Element der Seltenen Erden und einem Übergangsmetall, z. B. in ferrimagnetischen Gadolinium-Eisen-Legierungen beobachtet. Hier führt die optische Anregung mit Femtosekunden-Laserpulsen zu einer sehr schnellen Erwärmung der Elektronen zu Werten deutlich oberhalb der Curie-Temperatur und somit zu einem entsprechenden Verlust der Magnetisierung in dem magnetischen Material. Der Austausch von Spindrehimpuls zwischen den beiden unterschiedlichen Elementen kann dann eine Umkehrung der Magnetisierung bewirken. Entscheidend ist, dass die Temperatur des Atomgitters nur mäßig erhöht wird, so dass AOS von Natur aus energieeffizient ist. Während dieser Prozess sowohl theoretisch als auch experimentell ausgiebig untersucht worden ist, ist nur wenig über die maximalen Frequenzen von Schreib-/Löschzyklen mit aufeinanderfolgenden Laserpulsen bekannt, obwohl dies entscheidend für den Erfolg von AOS in zukünftigen Datenspeichern ist.

Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des Max-Born-Instituts und der Freien Universität Berlin konnten zwei Strategien umsetzen, um den zeitlichen Abstand zwischen zwei aufeinanderfolgenden Femtosekunden-Laserpulsen zu reduzieren, die die Magnetisierungsrichtung solcher magnetischen Legierungen immer noch erfolgreich hin- und herschalten können. Erstens konnte durch systematische Änderung der Wärmeübertragungsraten durch Verwendung von Substraten aus amorphem

Research Highlights

Accelerating write/erase cycles in all-optical magnetization switching

Magnetic bits for data storage can be written with ultrafast laser pulses, in contrast to the well-established path of using magnetic fields administered via a write head. Researchers at Max Born Institute and Freie Universität Berlin have now found a way to reduce the fundamentally required time between switching events to a record value of seven picoseconds.

According to an estimate of IBM the current daily production of digital information exceeds 2.5 quintillion bytes (equivalent to about 50 million of dual-layer Blu-ray discs, which stacked on top of each other would be 60 km high) and continues to grow at a staggering rate. The vast majority of this data is stored magnetically, where a binary bit, 0 or 1, corresponds to opposite magnetization directions, and is nowadays typically written or erased by current-driven electromagnets. As this process poses fundamental limitations with regards to speed and energy efficiency, the discovery of all-optical switching (AOS) allowing to set the magnetization direction only using light pulses – and hence to write or erase a magnetic bit – is hailed as an exciting new approach for future data storage technology. AOS has been observed in magnetic materials containing rare-earth elements and transition metals, e.g. in ferrimagnetic GdFe alloy. Here, optical excitation with femtosecond laser pulses leads to a very rapid heating of the electrons to well above the Curie temperature and a corresponding loss of the magnetization within the magnetic material. Exchange of spin angular momentum between the two elements Gd and Fe can then promote reversal of the respective magnetization. Importantly, the temperature of the atomic lattice is only very moderately increased, making AOS intrinsically energy efficient. While this process has been extensively studied, both theoretically and experimentally, only little is known about the maximal frequencies of write/erase cycles using subsequent laser pulses, crucial for the success of AOS in future data devices.

Scientists from the Max Born Institute and the Freie Universität Berlin followed two strategies to minimize the temporal separation of two consecutive femtosecond laser pulses to toggle the out-of-plane direction of the magnetization of such rare-earth transition metal alloys. First, by systematically changing the heat transfer rates using amorphous glass, crystalline silicon or polycrystalline diamond substrates below the alloy, it was demonstrated that efficient cooling rates of the magnetic system present a prerequisite to accelerate the sequence of write/erase cycles. Second and more importantly, replacing the transition metal iron by cobalt lead to a significantly faster recovery of the (switched) magnetization after optical excitation. The comparison of the ultrafast magnetization dynamics of a

Glas, kristallinem Silizium oder polykristallinem Diamant gezeigt werden, dass effiziente Kühlraten des magnetischen Systems eine Voraussetzung für die Beschleunigung der Sequenz des Doppelpuls-Umschaltens sind. Einen deutlich größeren Einfluss auf die Remagnetisierungsrate und damit auf die Frequenz der Schreib/Löschzyklen zeigte sich jedoch erst als das Übergangsmetall Eisen durch Kobalt ersetzt wurde. Der Vergleich der ultraschnellen Magnetisierungsdynamik einer GdFe- und GdCo-Legierung nach Einzelpulsanregung ist in Abb. 1a) dargestellt. Während die anfängliche Entmagnetisierung sehr ähnlich ist, ist die Relaxationsrate zu einem umgekehrten magnetischen Zustand deutlich unterschiedlich. Während GdCo seine Magnetisierung innerhalb von 5 ps auf 60% umkehrt, wird der gleiche Wert in GdFe erst nach etwa 200 ps erreicht. Die Forschenden erklären diese Beobachtung mit der stärkeren Austauschwechselwirkung zwischen benachbarten Kobalt Atomen (Co-Co) im Vergleich zu benachbarten Eisen Atomen (Fe-Fe), die zu einer schnelleren magnetischen Ordnung des Übergangsmetall-Untergitters führt. Die entsprechenden Ergebnisse der Doppelpulsexperimente für GdCo sind in Abb. 1b und c dargestellt: Die magneto-optischen Bilder zeigen eine entgegengesetzte Magnetisierungsrichtung des Endzustands bei einem Puls-zu-Puls-Abstand von nur $\Delta t_{12}=7$ ps. In b) reicht die Fluenz des zweiten Pulses, F_2 , nicht aus, um die vom ersten Puls gesetzte Magnetisierung zu beeinflussen. In c) wurde die Energie des zweiten Pulses, F_2 , erhöht, sodass die Magnetisierung erfolgreich wieder zurückgeschaltet werden konnte. Nach dem besten Wissen des Teams ist dies die bisher schnellste beobachtete Sequenz einer Magnetisierungsumschaltung: nahezu Terahertz-Wiederholraten werden für Schreib-/Löschzyklen von magnetischen Bits erreicht.

GdFe and GdCo alloy after single pulse excitation is shown in Fig. 1a). While the initial demagnetization is very similar, the relaxation rate to a reversed magnetic state is vastly different. While GdCo reverses its magnetization to 60% within 5 ps, in GdFe the same value is reached only after approximately 200 ps. The researchers rationalized this observation by the stronger Co-Co vs. Fe-Fe exchange interaction leading to a faster magnetic ordering of the transition metal sublattice. The respective results of the double pulse experiments for GdCo are shown in Fig. 1b and c: magneto-optical images display the opposite magnetization direction of the final state for a pulse-to-pulse separation of only $\Delta t_{12}=7$ ps. In b) the fluence of the second pulse, F_2 , is insufficient to influence the magnetization set by the first pulse. In c) F_2 is increased and the magnetization is successfully switched back.

To the best of the team's knowledge, this presents the fastest sequence of magnetization reversal to date, approaching terahertz repetition rates for write/erase cycles of magnetic bits.

Original publication:

Accelerating double pulse all-optical write/erase cycles in metallic ferrimagnets

F. Steinbach, N. Stetzuhn, D. Engel, U. Axtitia, C. von Korff Schmising, S. Eisebitt
Applied Physics Letters 120 (2022) 112406/1-7
<https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0080351>

Contact: F. Steinbach, Tel. 1342, C. Korff Schmising, Tel. 1372, S. Eisebitt, Tel. 1300

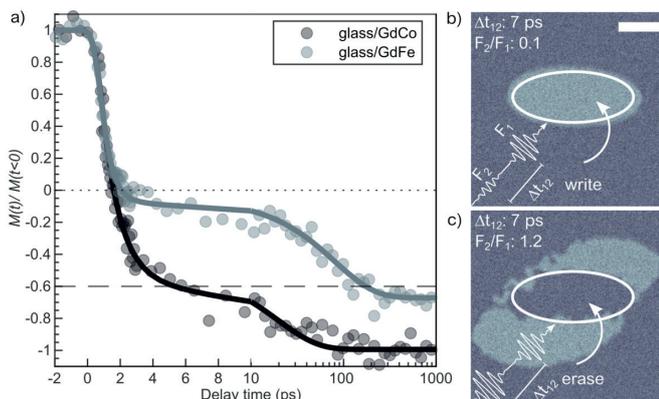


Fig. 1.: Ultrafast switching dynamics of a GdFe and GdCo alloy, showing the magnetization as a function of time after the laser pulse. The scaling of the time axis is linear up to 10 ps and logarithmic for later times. The relaxation to a reversed magnetic state is greatly accelerated in GdCo, where after 5 ps the magnetization has already recovered to $M(5\text{ps})/M(t<0) \sim -0.6$. To reach the same value takes ~ 200 ps in GdFe. b) and c) Final state magneto-optical images after double-pulse excitation with a pulse-to-pulse separation of $\Delta t_{12}=7$ ps in GdCo. Bright and dark areas correspond to opposite magnetization directions. For low fluences of the second pulse the magnetic state written by the first pulse remains unaltered, while for higher fluence of the second pulse the magnetic bit is erased. This presents the fastest write/erase cycle for magnetic information reported in literature. The scale bar in b) corresponds to 10 μm .

Abb. 1.: Ultraschnelle Schaltdynamik einer GdFe- und GdCo-Legierung. Die Skalierung der Zeitachse ist geteilt: bis 10 ps ist die Zeit linear, danach logarithmisch dargestellt. Die Relaxation zu einem umgekehrten magnetischen Zustand ist in GdCo stark beschleunigt. Hier erreicht die Magnetisierung bereits nach 5 ps $M(5\text{ps})/M(t<0) \sim -0.6$. Der gleiche Wert wird in GdFe erst nach ~ 200 ps erreicht. b) und c) Magneto-optische Bilder des Endzustands nach Doppelpulsanregung mit einem Puls-zu-Puls-Abstand von $\Delta t_{12}=7$ ps in GdCo. Helle und dunkle Bereiche entsprechen den entgegengesetzten Magnetisierungsrichtungen. Bei niedrigen Energien, F_2 , des zweiten Pulses bleibt der durch den ersten Puls geschriebene magnetische Zustand unverändert, bei höheren Energiewerten des zweiten Pulses, F_2 , wird das magnetische Bit wieder gelöscht. Dies ist der schnellste in der Literatur beschriebene Schreib-/Löschzyklus für magnetische Informationen. Der Skalenbalken in b) entspricht 10 μm .

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Forschungsergebnisse

Elektronen schaukeln lange – Röntgenexperimente zeichnen ultraschnelle Ladungsdynamik in Kristallen auf

Ein Kristallgitter besteht aus einer großen Zahl von Einheitszellen mit einer identischen Anordnung von Atomen. Phononen sind quantisierte Anregungen eines Kristallgitters, die Schwingungen seiner Atome entsprechen. Gemäß dem sog. adiabatischen physikalischen Bild folgen Elektronen den Bewegungen der Atomkerne ohne jegliche Verzögerung, d.h., Atomkerne und Elektronen bewegen sich gemeinsam. Während dieses Bild für Elektronen in den inneren Schalen eines Atoms gültig ist, versagt es für die Valenzelektronen, die sich die Atome innerhalb der Elementarzelle teilen. Eine spezielle Sorte von Phononen sind die sogenannten weichen Moden (*engl. soft modes*), bei denen die Elektronen über große interatomare Abstände bewegt werden und damit die elektrischen Eigenschaften des Kristalls verändern. Die Eigenschaften von soft modes wurden in den letzten Jahrzehnten zwar intensiv untersucht, sind aber weitgehend unverstanden. Für ein besseres Verständnis ist es notwendig, die zeitabhängigen Atompositionen und die Elektronendichte innerhalb der Einheitszelle synchron experimentell abzubilden. Hierbei spielt Femtosekunden-Röntgenbeugung eine Schlüsselrolle

Forscher am MBI haben jetzt Licht in das Rätsel gebracht und die konzertierte Bewegung von Elektronen und Atomkernen in kristallinen Festkörpern direkt abgebildet. Sie berichten in zwei vor Kurzem veröffentlichten Artikeln [1,2], wie Schwingungsbewegungen von Atomkernen Elektronenbewegungen hervorrufen, die sich über etwa 500 mal größere Distanzen erstrecken als die Auslenkungen der Atomkerne selbst. Mit Femtosekunden-Röntgenbeugung wurden zwei prototypische polykristalline Materialien untersucht, kubisches Bornitrid (cBN) [1] und Kaliumdihydrogenphosphat (KH_2PO_4 , KDP) [2]. Die Experimente führten zur Entdeckung von zwei verwandten Phänomenen. (i) Die Anregung von akustischen Zonenrand-Phononen in cBN ist mit einer Verlagerung von Valenzelektronen aus Zwischen-gitterplätzen der Einheitszelle auf die Atome verbunden, was zu einer räumlichen Konzentration der Elektronendichte führt. (ii) Die kohärente Anregung einer niederfrequenten soft mode in paraelektrischem KDP führt zu ausdauernden Schaukelbewegungen von Valenzelektronen zwischen verschiedenen Atomen innerhalb der Einheitszelle.

Das Team baute hierzu ein Röntgenbeugungsexperiment mit Femtosekunden-Zeitauflösung auf, welches in Kombination mit der sogenannten Maximum-Entropie-Methode erlaubt, Schnapshots der momentanen Elektronenverteilung in der Einheitszelle des jeweiligen Kristalls aufzunehmen. Röntgenbeugung erfasst Elektronen in den inneren Schalen nahe am Atomkern und Valenzelektronen und stellt somit das perfekte

Research Highlights

Persistent swinging of electrons between atomic sites in crystals

Phonons are quantum excitations which correspond to vibrations of the regular atomic array of a crystal. This crystal lattice consists of a large number of unit cells with an identical atomic arrangement. In the elementary adiabatic picture, the motions of electrons in the crystal follow the motion of the atomic nuclei instantly, i.e., atomic nuclei and electrons are moving as a single entity. While this physical picture is valid for the inner, so-called core electrons of an atom it fails for the valence electrons, which are shared by different atoms within its unit cell. A special type of phonons, the soft modes, can relocate electrons and, thus, change the electric properties of a crystal considerably. The properties of soft modes have been investigated for decades but are not sufficiently understood. A key prerequisite for a better understanding is to map atomic vibrations and charge motions simultaneously. This can be done by femtosecond x-ray diffraction

Researchers at the MBI have now elucidated in space and time concerted electron and nuclear motions in crystalline solids. As they report in two recent publications [1,2], phonon motions drive electrons over distances in the crystal which are about 500 times larger than the nuclear displacements. Femtosecond x-ray powder diffraction experiments on two prototypical crystals, cubic boron nitride (cBN) [1] and potassium dihydrogen phosphate (KH_2PO_4 , KDP) [2], an ionic material, lead to the discovery of two related phenomena. (i) Excitation of acoustic zone-boundary phonons in cBN is connected with to a relocation of valence electrons from interstitial regions of the unit cell onto the atoms, thus sharpening the electron distribution in space. (ii) Coherent excitation of a low-frequency soft mode in paraelectric KDP results in a long-lasting, so-called underdamped swinging of electrons between atoms.

The team has implemented a Raman pump - x-ray-diffraction probe technique in combination with the Maximum Entropy Method (MEM) for charge density analysis to take a series of snapshots of electron density within the unit cell of the respective crystal. X-ray diffraction is very sensitive to both atomic and valence charge, thus representing a perfect tool to map nuclear positions and valence charge density on atomic length and time scales. In the experiments, an ultrashort optical pulse triggers atomic phonon motions in a powder sample, consisting of small crystallites, via impulsive Raman excitation (the pump). Femtosecond hard x-ray pulses (the probe) are diffracted from the excited sample and generate a diffraction snapshot of the momentary charge arrangement in the unit cell of the crystal. Changing the arrival time of the probe pulse relative to the pump pulse allows for recording a diffraction

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Werkzeug dar, um die Atompositionen und die Valenzelektronendichte auf atomaren Längen- und Zeitskalen zu verfolgen. In den Experimenten löst ein ultrakurzer optischer Lichtimpuls mittels impulsiver Raman-Streuung atomare Schwingungsbewegungen, d.h. Phononanregungen in einer Pulverprobe aus, die aus vielen kleinen Kristalliten besteht. Femtosekunden-Abtastimpulse harter Röntgenstrahlung werden dann an der angeregten Probe gebeugt. Aus dem Beugungsbild lässt sich dann die augenblickliche Elektronendichtekarte der Einheitszelle rekonstruieren. Verändert man nun die Ankunftszeit des Röntgen-Abtastimpulses gegenüber der des Anreg-Lichtimpulses lässt sich ein Film drehen, der die Zeitentwicklung der Atompositionen und Elektronendichtekarte direkt zeigt. Die nichtresonante impulsive Raman-Anregung stellt sicher, dass der untersuchte Kristall dabei im elektronischen Grundzustand bleibt.

Abbildung 1 zeigt die zeitabhängige Intensität des (111) Bragg-Reflexes von cBN nach einer Raman-Anregung zweiter Ordnung, die Paare von akustischen Zonenrand-Phononen erzeugt [1]. Der experimentell beobachtete Zuwachs an gebeugter Intensität zeigt unmittelbar eine Umverteilung von Valenzelektronen aus den Zwischengitterplätzen der Einheitszelle auf die Atome. Dieses Phänomen lässt sich in den zeitabhängigen Elektronendichtekarten in Abb. 2 direkt verfolgen. Die beobachteten Oszillationen haben ihren Ursprung in einer kohärenten Überlagerung von zwei Phononen mit einem sehr kleinen Frequenzunterschied.

Abbildung 3 zeigt zeitabhängige Elektronendichtekarten von paraelektrischem KDP für zwei unterschiedliche Verzögerungszeiten zwischen Anreg- und Abtastimpuls nach einer kohärenten Anregung der soft mode [2]. Die Schwingungsbewegung der Atomkerne führt zu einer lang anhaltenden Schaukelbewegung der Elektronen zwischen verschiedenen Atomen in der Einheitszelle aufgrund des longitudinalen Charakters der soft mode. Dieses Verhalten steht im krassen Widerspruch zu Vorhersagen der bisherigen Literatur, die bislang von einem transversalen Charakter dieser Phononen ausging. Die Elektronendichtekarten zeigen sowohl einen Elektronentransfer zwischen Kalium- und Phosphoratomen [Teilbild (b)] wie auch eine ausgeprägte Elektronenumverteilung innerhalb des Phosphat-Ions von den Phosphor zu den Sauerstoff-Atomen [Teilbild (c)]

Der vielleicht interessanteste Aspekt dieser experimentellen Beobachtungen ist die Tatsache, dass in beiden Fällen die Umverteilung von Valenzelektronen auf der Längenskala von interatomaren Abständen erfolgt, d.h., um mehrere Angström (10^{-10} m), während die Kernausslenkungen der soft mode sich nur im Subpikometerbereich (10^{-12} m) bewegen. Auf diese Weise wird die elektrostatische Energie des Kristalls während der Phononanregung minimiert. Diese Ergebnisse definieren einen neuen Vergleichsmaßstab für eine adäquate quantenmechanische Beschreibung von soft modes und bereiten den Weg für zukünftige Studien von Funktionsmaterialien, z.B. solche mit ferroelektrischen Eigenschaften.

pattern for each pump-probe delay, resulting in a movie of the promoted nuclear and electronic motions. Off-resonant impulsive Raman excitation ensures that the crystal remains in its electronic ground state.

Figure 1 shows the transient intensity of (111) Bragg reflection from cBN after second order Raman excitation of acoustic zone-boundary phonons [1]. The observed increase of diffracted intensity demonstrates most directly a relocation of valence electrons from interstitial regions of the unit cell onto the atoms, as visualized in the transient electron density maps for different pump-probe delays (Fig. 2). The oscillations originate from a coherent superposition of phonons with a slightly different frequency.

Figure 3 displays transient electron-density maps of paraelectric KDP for two pump-probe delays after coherent excitation of a soft mode [2]. The oscillatory motion of the nuclei leads to a long-lasting swinging of electrons between atoms in the ionic unit cell. This behaviour is in striking contrast to predictions from literature and due to the longitudinal character of the nuclear motions. The electron density maps exhibit both a valence-charge transfer between the K and P atoms [panel (b)] and a pronounced electron relocation within the phosphate ion from the P to the O atoms [panel (c)].

Most interesting is the fact that in both cases the observed relocation of electronic charge occurs on the length scale of interatomic distances, i.e., several angströms (10^{-10} m) whereas the underlying nuclear displacements occur on the sub-picometer (10^{-12} m) scale. In this way, the electrostatic energy content of the crystal is minimized during the period over which the phonon excitations exist. These findings serve as a benchmark for developing an adequate quantum description of soft modes and pave the way for future studies of a broad range of functional materials with, e.g., ferroelectric properties.

Original Publication:

[1] Shekhar Priyadarshi, Isabel Gonzalez-Vallejo, Christoph Hauf, Klaus Reimann, Michael Woerner, Thomas Elsaesser
„Phonon-Induced Relocation of Valence Charge in Boron Nitride Observed by Ultrafast X-ray Diffraction.“
Physical Review Letters **128**, 136402 (2022)

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.128.136402>

[2] Isabel Gonzalez-Vallejo, Azize Koç, Klaus Reimann, Michael Woerner, Thomas Elsaesser
„Underdamped longitudinal soft modes in ionic crystallites—lattice and charge motions observed by ultrafast x-ray diffraction.“
Structural Dynamics **9**, 024501 (2022).

<https://aca.scitation.org/doi/full/10.1063/4.0000143>

Contact: I. Gonzalez-Vallejo, Tel. 1473, K. Reimann, Tel. 1476, M. Woerner, Tel. 1470. T. Elsaesser, Tel. 1400

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

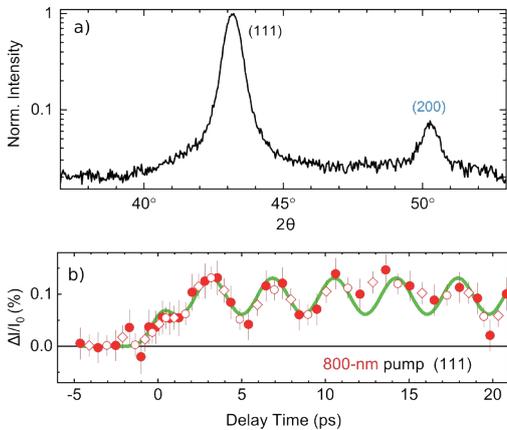


Abb. 1. (a) Stationäres Beugungsbild von cBN-Pulver, integriert über die Debye-Scherrer-Ringe und gemessen mit Femtosekunden-Röntgenimpulsen als Funktion des Beugungswinkels 2θ . (b) Zeitabhängige Intensitätsänderung des (111) Beugungsreflexes nach impulsiver Raman-Anregung mit 800-nm Anreg-Lichtimpulsen. (gefüllte Symbole, Mittelung über ein 1 ps langes Zeitintervall, offene Symbole, die gleichen Daten mit verschobenen 1 ps langen Zeitintervallen). Grüne Kurve: stufenartige Anpasskurve überlagert von Oszillationen mit einer Frequenz von 250 GHz

Fig. 1: a) Stationary diffraction pattern of cBN powder, integrated over the Debye-Scherrer rings, measured with femtosecond x-ray pulses as a function of the diffraction angle 2θ . b) Transient intensity change of the (111) diffraction signal after impulsive Raman excitation with femtosecond 800-nm pump pulses (solid circles, 1 ps temporal binning). Open symbols: same data with shifted 1-ps binning. Green line: step-like fit superimposed on oscillations with a frequency of 250 GHz.

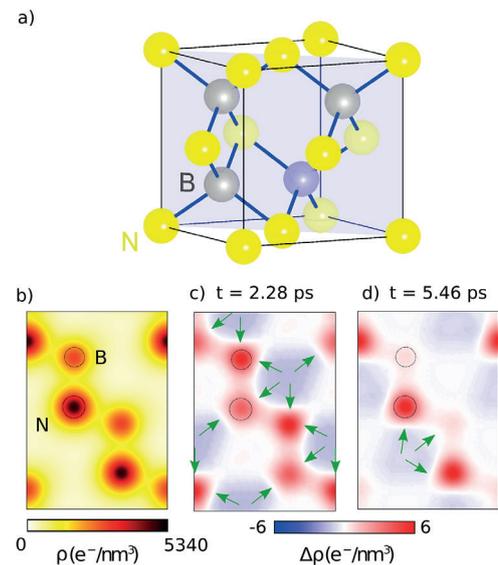


Abb. 2. (a) Einheitszelle von cBN mit Bor- (B) und Stickstoff-Atomen (N) und die (1-10) Ebene angedeutet in Hellblau. (b) Stationäre Elektronendichtekarte $\rho_0(r)$ in der (1-10) Ebene. (c) und (d) Zeitabhängige differentielle Ladungsdichtekarten $\Delta\rho(r,t)$ beobachtet bei Verzögerungszeiten von $t = 2.28$ ps bzw. $t = 5.46$ ps. Die grünen Pfeile deuten die Umverteilung der Valenzelektronendichte an.

Fig. 2: a) Unit cell of cBN with boron (B) and nitrogen (N) atoms and the (1-10) plane shown in light blue. b) Stationary electron density map $\rho_0(r)$ in the (1-10) plane. c) and d) Transient differential charge density maps $\Delta\rho(r,t)$ measured at delay times $t = 2.28$ ps and $t = 5.46$ ps. Green arrows represent the valence charge relocation

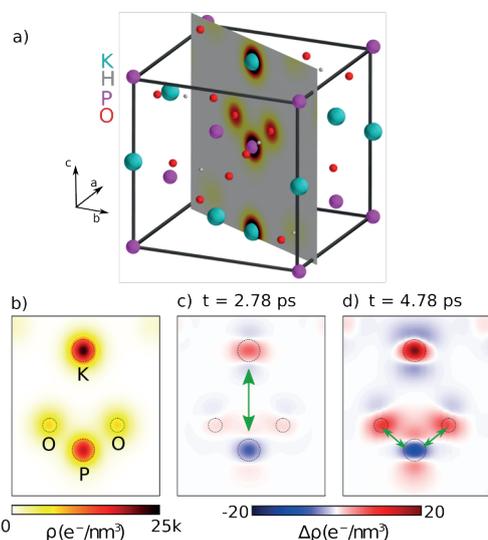


Abb. 3. (a) Einheitszelle von paraelektrischem KDP. (b) Gleichgewichts-Elektronendichtekarte bei Raumtemperatur: $\rho_0(r)$ wird in der grauen Ebene von Teilbild (a) gezeigt, welche ein Kalium- (K), ein Phosphor-Atom (P) und die beiden oberen Sauerstoffatome (O) der Phosphat-Gruppe enthält. Die gestrichelten Kreise deuten die Atompositionen an. (c) und (d) Zeitabhängige Elektronendichtekarten $\Delta\rho(r,t)$ an ausgewählten Verzögerungszeiten t nach impulsiver Raman-Anregung der soft mode. Die grünen Pfeile deuten die Umverteilung der Valenzelektronendichte an.

Fig. 3: a) Unit cell of paraelectric KDP. b) Equilibrium electron density map at room temperature, $\rho_0(r)$ is shown in the gray plane of a) containing the potassium (K), phosphorus (P), and the two upper oxygen (O) atoms of the phosphate group. The dashed lines represent the atomic positions. c) and d) Transient electron density maps $\Delta\rho(r,t)$ at selected delay times t after impulsive-Raman excitation of the soft mode. Green arrows show the directions of the valence charge relocation.

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Allgemein



Liebe Kolleginnen und Kollegen,

das Stadtradeln (STADTRADELN - Darum geht es!) beginnt bald. Daher habe ich wie letztes Jahr wieder ein Unterteam gebildet, so dass eure/Ihre Kilometer unter dem Team "Gesundheitswerk Adlershof - MBI" gezählt wird.

Hier ist der Link zum Registrieren:

https://www.stadtradeln.de/index.php?id=171&L=0&team_preselect=4410&subteam_preselect=8805

Auch in diesem Jahr gilt: Nur wenn Sie sich zusätzlich in der App „Gesund & Clever“ zum „Stadtradeln“ einbuchen, können wir aus Projektmitteln des bundesweit größten Modellprojekts zum Betrieblichen Gesundheitsmanagement wieder Aufmerksamkeiten an die dort auch registrierten ausloben bzw. verlosen und unserer großes kostenfreies Portfolio ständig auf Basis der Resonanz erweitern.

Den Zugang, wenn noch nicht bekannt, finden Sie hier:



Im letzten Jahr wurden über 66400 km und der Platz 5 aller Berliner Teams erreicht.

Ich hoffe, dass sich wieder viele beteiligen.

Viele Grüße
Margret Rink
Tel. 1551

General



Dear colleagues,

The city cycling campaign (CITY CYCLING - Here's what it's all about!) starts soon. That's why I formed a sub-team like last year, so that your kilometers are counted under the „Gesundheitswerk Adlershof - MBI“ team.

Here is the link to register:

https://www.stadtradeln.de/index.php?id=171&L=0&team_preselect=4410&subteam_preselect=8805

Also this year the following applies: only if you also register for the “City Cycling” in the “Healthy & Clever” app we can use project funds from Germany's largest model project for company health management to award or raffle gifts to those who are registered there and expanding constantly our big free portfolio based on the response.

In case you do not know the access yet, you can find it here:



Last year, over 66,400 km were cycled and the 5th place among all Berlin teams was achieved.

I hope that many will participate again.

Best regards,
Margret Rink
Tel. 1551

MBI Interner Newsletter

13. Jahrgang - Ausgabe 46 - Mai 2022

Termine - Save the date

Samstag, 2 Juli 2022

Lange Nacht der Wissenschaften/LNW
Long Night of Science

n.n.

MBI Symposium

29. & 30. September 2022

Wissenschaftlicher Beirat/SAB

Donnerstag, 1. September 2022



10. Adlershofer Firmenstaffel - Der Jubiläumslauf
Startzeit Hauptwettbewerb: 16:30 Uhr

<https://adlershofer-firmenstaffel.de/>

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.