

Zwischenbericht (Sachbericht)

|  |                              |
|--|------------------------------|
| <b>Förderinstrument:</b>                 | Helmholtz-Nachwuchsgruppen   |
| <b>Impulsfonds-Förderkennzeichen:</b>    | VH-NG-904                    |
| <b>Projekttitle:</b>                     | Watching Chemistry in Action |
| <b>Nachwuchsgruppenleiter/in:</b>        | Daniel Rolles                |
| <b>Helmholtz-Zentrum:</b>                | DESY                         |
| <b>Beteiligte Hochschule:</b>            | Universität Göttingen        |
| <b>Berichtszeitraum (=Kalenderjahr):</b> | 01/2013-12/2013              |

**1) Struktur der Nachwuchsgruppe**

*Berichten Sie kurz über Aufbau und personelle Entwicklung Ihrer Gruppe.*

Die Nachwuchsgruppe startete am 01.01.2013 mit mir als Gruppenleiter, einem Post-Doc, sowie zwei von der MPG bezahlten Doktoranden, die ich aus meiner vorherigen Max-Planck Arbeitsgruppe übernehmen konnte. Der ebenfalls von der Max-Planck Arbeitsgruppe übernommene Post-Doc schied, wie geplant, zum 31.03. aus, und zum 01.02. und 01.04. konnte ich jeweils einen neuen Post-Doc anstellen. Im Dezember 2013 begann ein neuer Doktorand, der ab dem 01.01.2014 über die Uni Göttingen finanziert wird. Damit ist die Gruppe mit zwei Post-Docs und drei Doktoranden bei ihrer momentanen Soll-Stärke angekommen. Darüber hinaus waren im Sommer 2013 zwei Sommerstudenten für zwei bzw. drei Monate in der Gruppe beschäftigt, und im Herbst wurde für 3 Wochen ein Schülerpraktikant betreut.

**2) Vernetzung**

*Stellen Sie dar, auf welche Weise Sie und Ihre Nachwuchsgruppe innerhalb des Helmholtz-Zentrums und (ggf.) der Universität eingebunden sind (ggf. auch als Mitglied von Gremien).*

Innerhalb des Helmholtz-Zentrums ist die Nachwuchsgruppe in der Abteilung Photon Science – FLASH (FS-FL) angesiedelt und nimmt an den allgemeinen Photon Science- und FLASH-Gruppensitzungen und Seminaren teil, die z.T. von mir mitorganisiert werden. Darüber hinaus ist die Gruppe mit dem Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) assoziiert, wo wir mit einigen Arbeitsgruppen in enger Kollaboration stehen. Des Weiteren teile ich mir im Rahmen des CAMP-Projektes bei FLASH einen Post-Doc mit der FS-Detektorgruppe. An der Uni Göttingen bin ich im Rahmen einer Brückenvereinbarung zwischen DESY und dem Göttingen Research Campus unter der Führung von Prof. Simone Techert innerhalb der SFB 755 wissenschaftlich eingebunden. Ich habe dort an mehreren SFB-Seminaren und Begutachtungen teilgenommen und auch selber vorgetragen, und plane zusammen mit Simone Techert eine Lehrveranstaltung für das laufende Semester.

**3) Zufriedenheit**

*Wie zufrieden sind Sie mit den Rahmenbedingungen, die Sie am Helmholtz-Zentrum und an der Universität vorfinden? Haben Sie Kritikpunkte?*

Die wissenschaftlichen und organisatorischen Rahmenbedingungen am DESY sind exzellent, und die Unterstützung auf allen Ebenen ist hervorragend. Die Zusammenarbeit mit der Uni Göttingen lief, z.T. allein wegen der geographischen Entfernung, etwas langsamer an, aber auch dort ist die Unterstützung, insbesondere durch Simone Techert, insgesamt sehr gut und unbürokratisch.

**4) Arbeitsfortschritt / Meilensteine**

*Welche Fortschritte wurden im geplanten Arbeitsprogramm gemacht? Welche wichtigen Meilensteine konnten im Berichtsjahr erreicht werden? Waren Abweichungen vom Arbeitsprogramm notwendig?*

Durch den fliegenden Wechsel und die personelle Kontinuität beim Übergang von der Max-Planck Arbeitsgruppe in die Helmholtz-Nachwuchsgruppe konnte vom ersten Tag an voll an

dem geplanten Arbeitsprogramm gearbeitet werden. So wurden im Jahr 2013 drei FEL-Messzeiten am LCLS in Stanford sowie vier Synchrotron-Messzeiten bei PETRA, der ALS, und SOLEIL durchgeführt und die Datenauswertung von existierenden und neuen Messdaten intensiv weitergeführt und z.T. abgeschlossen. Die vom LCLS zurück nach Hamburg transportierte CAMP-Kammer wurde wieder zusammengebaut und deren in diesem Jahr stattfindende Installation am FLASH vorbereitet.

Auf Grund von baulichen Verzögerungen hat sich der Aufbau eines Laserlabors am DESY etwas verschoben und ist nun für das laufende Jahr geplant. Die dafür vorgesehene Vakuum-Apparatur konnte dennoch wie geplant aufgebaut werden. Die entsprechenden Detektoren und Spektrometer wurden im Rahmen von Kollaborationen mit einer Helium-Lampe und einer Elektronenkanone getestet.

**5) Finanz-/Zeitplan**

*Können Sie Finanz- und Zeitplan einhalten oder sind Anpassungen notwendig?*

Auf Grund von veralteten Zahlen bei der Antragstellung fallen höher als geplante Personalkosten an, so dass der für Investitionen zur Verfügung stehende Betrag geringer ist als ursprünglich vorgesehen. Dies hatte bisher jedoch noch keine negativen Auswirkungen, kann jedoch unter Umständen dazu führen, dass der Auf- und Ausbau des Laserlabors etwas langsamer vorangetrieben werden kann als geplant.

Durch die höheren Personalkosten ist rein formal auch ein Ungleichgewicht zwischen den auf die HGF und DESY laufenden Kostenstellen entstanden, das aber für das laufende Jahr durch eine entsprechende Umbuchung problemlos ausgeglichen werden kann.

**6) Status**

*Haben Sie eine gemeinsame Juniorprofessur oder eine W2/W3-Professur? Streben Sie diesen Status an? Wie ist der Stand der Verhandlungen?*

Eine Juniorprofessur ist nicht angestrebt, jedoch habe ich mit der Uni Göttingen über die Möglichkeit einer Habilitation gesprochen. Die Vorbereitungen dazu, insbesondere die Planung von Lehrveranstaltungen (s.u.), sind im Gange.

**7) Lehrveranstaltungen der/s Nachwuchsgruppenleiters/in**

Im Jahr 2013 habe ich, außer der Betreuung eines Doktorandenseminars am DESY, keine formalen Lehrveranstaltungen durchgeführt. Allerdings wurden intensive Diskussionen mit der Uni Göttingen über die Durchführung eines Fortgeschrittenen-Praktikums für Göttinger Master-Studenten am DESY sowie über eine „delokalisierte“ Vorlesung im Rahmen der Brückenvereinbarung zwischen DESY und dem Göttingen Research Campus geführt. Beides ist für das laufende Jahr geplant.

Darüber hinaus habe bzw. werde ich im laufenden Jahr Lehrveranstaltungen im Rahmen der Hamburger CUI Graduate Days und der Heidelberger Graduiertentage anbieten.

**8) Publikationen der Gruppe**

siehe beiliegenden Veröffentlichungsliste für das Jahr 2013.

**9) Drittmittel**

Förderung eines wissenschaftlichen Austauschbesuches mit der St. Petersburg State University durch das German/Russian Interdisciplinary Science Center (G-RISC).

**10) Patentanmeldungen**

*Anzahl angemeldeter/erteilter Patente*

keine

**11) Preise / Auszeichnungen an Gruppenmitglieder / Rufe an Gruppenleiter/in**

keine

**Publications of the Rolles Young Investigator Group in 2013**

1. R. Boll, D. Anielski, C. Bostedt, J.D. Bozek, L. Christensen, R. Coffee, S. De, P. Decleva, S.W. Epp, B. Erk, L. Foucar, F. Krasniqi, J. Küpper, A. Rouzée, B. Rudek, A. Rudenko, S. Schorb, H. Stapelfeldt, M. Stener, S. Stern, S. Techert, S. Trippel, M.J.J. Vrakking, J. Ullrich, and D. Rolles, *Femtosecond Photoelectron Diffraction on Laser-Aligned Molecules: Towards Time-Resolved Imaging of Molecular Structure*, Phys. Rev. A **88**, 061402(R) (2013).
2. B. Erk, D. Rolles, L. Foucar, B. Rudek, S.W. Epp, M. Cryle, C. Bostedt, S. Schorb, J. Bozek, A. Rouzee, A. Hundertmark, T. Marchenko, M. Simon, F. Filsinger, L. Christensen, S. De, S. Trippel, J. Küpper, H. Stapelfeldt, S. Wada, K. Ueda, M. Swiggers, M. Messerschmidt, C.D. Schröter, R. Moshhammer, I. Schlichting, J. Ullrich, and A. Rudenko, *Ultrafast charge rearrangement and nuclear dynamics upon inner-shell multiple ionization of small polyatomic molecules*, Phys. Rev. Lett. **110**, 053003 (2013).
3. B. Rudek, D. Rolles, S.-K. Son, L. Foucar, B. Erk, S. Epp, R. Boll, D. Anielski, C. Bostedt, S. Schorb, R. Coffee, J. Bozek, S. Trippel, T. Marchenko, M. Simon, L. Christensen, S. De, S. Wada, K. Ueda, I. Schlichting, R. Santra, J. Ullrich, and A. Rudenko, *Resonance-Enhanced Multiple Ionization of Krypton at an X-Ray Free-Electron Laser*, Phys. Rev. A **87**, 023413 (2013).
4. B. Erk, D. Rolles, L. Foucar, B. Rudek, S.W. Epp, M. Cryle, C. Bostedt, S. Schorb, J. Bozek, A. Rouzee, A. Hundertmark, T. Marchenko, M. Simon, F. Filsinger, L. Christensen, S. De, S. Trippel, J. Küpper, H. Stapelfeldt, S. Wada, K. Ueda, M. Swiggers, M. Messerschmidt, C.D. Schröter, R. Moshhammer, I. Schlichting, J. Ullrich, and A. Rudenko, *Inner-shell multiple ionization of polyatomic molecules with an intense X-ray Free-Electron Laser studied by coincident ion momentum imaging*, J. Phys. B **46**, 164031 (2013).
5. D. Rolles, *Trendbericht Physikalische Chemie 2012: Molekülkino – Experimente mit Freielektronen-Lasern*, Nachr. a. d. Chemie **61**, 313 (2013).
6. K. Schnorr, A. Senftleben, M. Kurka, A. Rudenko, L. Foucar, G. Schmid, A. Broska, T. Pfeifer, K. Meyer, D. Anielski, R. Boll, D. Rolles, M. Kübel, M.F. Kling, Y.H. Jiang, S. Mondal, T. Tachibana, K. Ueda, T. Marchenko, M. Simon, G. Brenner, R. Treusch, S. Scheit, V. Averbukh, J. Ullrich, C.D. Schröter, and R. Moshhammer, *Time-Resolved Measurement of Interatomic Coulombic Decay in Ne<sub>2</sub>*, Phys. Rev. Lett. **111**, 093402 (2013).
7. Y. H. Jiang, A. Senftleben, M. Kurka, A. Rudenko, L. Foucar, O. Herrwerth, M.F. Kling, M. Lezius, J. van Tilborg, A. Belkacem, K. Ueda, D. Rolles, R. Treusch, Y.Zh. Zhang, Y.F. Liu, C.D. Schröter, J. Ullrich, and R. Moshhammer, *Ultrafast dynamics in acetylene clocked in a femtosecond XUV stopwatch*, J. Phys. B **46**, 164027 (2013).
8. E. Pedersoli, N.D. Loh, F. Capotondi, C. Y. Hampton, R. G. Sierra, D. Starodub, C. Bostedt, J. D. Bozek, A. J. Nelson, M. Aslam, S. Li, V. P. Dravid, A. V. Martin, A. Aquila, A. Barty, H. Fleckenstein, L. Gumprecht, M. Liang, K. Nass, J. Schulz, T. A. White, N. Coppola, S. Bajt, M. Barthelmess, H. Graafsma, H. Hirsemann, C. Wunderer, S. W. Epp, B. Erk, B. Rudek, A. Rudenko, L. Foucar, S. Kassemeyer, L. Lomb, D. Rolles, R. L. Shoeman, J. Steinbrener, R. Hartmann, A. Hartmann, G. Hauser, P. Holl, N. Kimmel, C. Reich, H. Soltau, G. Weidenspointner, W. H. Benner, G. R. Farquar, S. P. Hau-Riege, M. S. Hunter, T. Ekeberg, M. Hantke, F. R. N. C. Maia, H. J. Tobias, S. Marchesini, M. Frank, L. Strüder, I. Schlichting, J. Ullrich, H. N. Chapman, P. Bucksbaum, M. Kiskinova, and M. J. Bogan, *Mesoscale morphology of airborne core-shell nanoparticle clusters: X-ray laser coherent diffraction imaging*, J. Phys. B **46** 164033 (2013).
9. T. R. M. Barends, L. Foucar, R. L. Shoeman, S. Bari, S. W. Epp, R. Hartmann, G. Hauser, M. Huth, C. Kieser, L. Lomb, K. Motomura, K. Nagaya, C. Schmidt, R. Strecker, D. Anielski, R. Boll, B. Erk, H. Fukuzawa, E. Hartmann, T. Hatsui, P. Holl, Y. Inubushi, T. Ishikawa, S. Kassemeyer, C. Kaiser, F. Koeck, N. Kunishima, M. Kurka, D. Rolles, B. Rudek, A. Rudenko, T. Sato, C.-D. Schroeter, H.

- Soltau, L. Strueder, T. Tanaka, T. Togashi, K. Tono, J. Ullrich, S. Yase, S. Wada, M. Yao, M. Yabashi, K. Ueda, and Ilme Schlichting, *Anomalous signal from S atoms in protein crystallographic data from an X-ray free-electron laser*, Acta Cryst. D **69**, 838-842 (2013).
10. H. J. Park, N.D. Loh, R. G. Sierra, C. Y. Hampton, D. Starodub, A. V. Martin, A. Barty, A. Aquila, J. Schulz, J. Steinbrener, R. L. Shoeman, L. Lomb, S. Kassemeyer, C. Bostedt, J. D. Bozek, S. W. Epp, B. Erk, R. Hartmann, D. Rolles, A. Rudenko, B. Rudek, L. Foucar, N. Kimmel, G. Weidenspointner, G. Hauser, P. Holl, E. Pedersoli, M. Liang, M. S. Hunter, L. Gumprecht, N. Coppola, C. Wunderer, H. Graafsma, F. R. N. C. Maia, T. Ekeberg, M. Hantke, H. Fleckenstein, H. Hirsemann, K. Nass, T. A. White, H. J. Tobias, G. R. Farquar, W. H. Benner, S. P. Hau-Riege, C. Reich, A. Hartmann, H. Soltau, S. Marchesini, S. Bajt, M. Barthelmess, L. Strüder, J. Ullrich, P. Bucksbaum, M. Frank, I. Schlichting, H. N. Chapman, and M. J. Bogan, and V. Elser, *Towards unsupervised single-shot diffractive imaging of heterogeneous particles using X-ray free-electron lasers*, Opt. Express **21**, 28729-28742 (2013).
  11. N.D. Loh, D. Starodub, L. Lomb, C. Y. Hampton, A. V. Martin, R. G. Sierra, A. Barty, A. Aquila, J. Schulz, J. Steinbrener, R. L. Shoeman, S. Kassemeyer, C. Bostedt, J. D. Bozek, S. W. Epp, B. Erk, R. Hartmann, D. Rolles, A. Rudenko, B. Rudek, L. Foucar, N. Kimmel, G. Weidenspointner, G. Hauser, P. Holl, E. Pedersoli, M. Liang, M. S. Hunter, L. Gumprecht, N. Coppola, C. Wunderer, H. Graafsma, F. R. N. C. Maia, T. Ekeberg, M. Hantke, H. Fleckenstein, H. Hirsemann, K. Nass, T. A. White, H. J. Tobias, G. R. Farquar, W. H. Benner, S. P. Hau-Riege, C. Reich, A. Hartmann, H. Soltau, S. Marchesini, S. Bajt, M. Barthelmess, L. Strüder, J. Ullrich, P. Bucksbaum, K. O. Hodgson, M. Frank, I. Schlichting, H. N. Chapman, and M. J. Bogan, *Sensing the wavefront of x-ray free-electron lasers using aerosol spheres*, Opt. Express **21**, 12385-12394 (2013).
  12. C. Graves, A.H. Reid, T. Wang, B. Wu, S. de Jong, K. Vahaplar, I. Radu, D. P. Bernstein, M. Messerschmidt, L. Müller, R. Coffee, M. Bionta, S. W. Epp, R. Hartmann, N. Kimmel, G. Hauser, A. Hartmann, P. Holl, H. Gorke, J. H. Mentink, A. Tsukamoto, A. Fognini, J. J. Turner, W. F. Schlotter, D. Rolles, H. Soltau, L. Strüder, Y. Acremann, A.V. Kimel, A. Kirilyuk, Th. Rasing, J. Stöhr, A.O. Scherz, H.A. Dürr, *Nanoscale spin reversal by non-local angular momentum transfer following ultrafast laser excitation in ferrimagnetic GdFeCo*, Nature Materials **12**, 293 (2013).
  13. H. Fukuzawa, S.-K. Son, K. Motomura, S. Mondal, K. Nagaya, S. Wada, X.-J. Liu, R. Feifel, T. Tachibana, Y. Ito, M. Kimura, T. Sakai, K. Matsunami, H. Hayashita, J. Kajikawa, P. Johnsson, M. Siano, E. Kukk, B. Rudek, B. Erk, L. Foucar, E. Robert, C. Miron, K. Tono, Y. Inubushi, T. Hatsui, M. Yabashi, M. Yao, R. Santra, and K. Ueda, *Deep Inner-Shell Multiphoton Ionization by Intense X-Ray Free-Electron Laser Pulses*, Phys. Rev. Lett. **110**, 173005 (2013).
  14. K. Motomura, H. Fukuzawa, S.-K. Son, S. Mondal, T. Tachibana, Y. Ito, M. Kimura, K. Nagaya, T. Sakai, K. Matsunami, S. Wada, H. Hayashita, J. Kajikawa, X.-J. Liu, R. Feifel, P. Johnsson, M. Siano, E. Kukk, B. Rudek, B. Erk, L. Foucar, E. Robert, C. Miron, K. Tono, Y. Inubushi, T. Hatsui, M. Yabashi, M. Yao, R. Santra, and K. Ueda, *Sequential multiphoton multiple ionization of atomic argon and xenon irradiated by x-ray free-electron laser pulses from SACLA*, J. Phys. B **46**, 164024 (2013).