

Zwischenbericht (Sachbericht)

Förderinstrument:	Helmholtz-Nachwuchsgruppen
Impulsfonds-Förderkennzeichen:	VH-NG-904
Projekttitle:	Watching Chemistry in Action
Nachwuchsgruppenleiter/in:	Daniel Rolles
Helmholtz-Zentrum:	DESY
Beteiligte Hochschule:	Universität Göttingen
Berichtszeitraum (=Kalenderjahr):	01/2014-12/2014

1) Struktur der Nachwuchsgruppe

Berichten Sie kurz über Aufbau und personelle Entwicklung Ihrer Gruppe.

Die Nachwuchsgruppe besteht zur Zeit aus drei Post-Docs, zwei Doktoranden, sowie mir als Gruppenleiter. Einer der Doktoranden ist ein „Restposten“ aus meiner vorherigen Max-Planck Arbeitsgruppe und wird über das Max-Planck-Institut für Kernphysik finanziert. Er wird voraussichtlich im Sommer seine Doktorarbeit abschließen. Der zweite Doktorand wird im Rahmen der Nachwuchsgruppe über die Uni Göttingen finanziert, ebenso wie eine Post-Doktorandin, die im Juli 2014 in der Nachwuchsgruppe ihre Doktorarbeit abschloss und seitdem bei Simone Techert in Göttingen angestellt aber der Nachwuchsgruppe zugeordnet ist. Einen weiteren Post-Doc mit einer Vertrags-Restlaufzeit bis Juni 2015 konnte ich Ende 2014 kostenneutral von der FS-FL-Gruppe am DESY übernehmen. Er soll nach dem Ende seines Vertrages über die Nachwuchsgruppe weiterfinanziert werden. Im Sommer 2014 waren außerdem wieder zwei Sommerstudenten für zwei bzw. drei Monate in der Gruppe beschäftigt.

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 weiterhin 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. Seit Inbetriebnahme der von der Nachwuchsgruppe am FLASH betriebenen „CAMP“-Endstation hat sich diese Anbindung deutlich intensiviert. 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. Die über die Uni Göttingen finanzierten Gruppenmitglieder nehmen an regelmäßigen Treffen in Göttingen teil.

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 läuft, insbesondere durch Simone Techert, ebenfalls 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?

Der wichtigste Meilenstein des vergangenen Jahres war der Aufbau und die Inbetriebnahme der CAMP-Apparatur als permanent-installierte Endstation für Nutzerexperimente an der FLASH Beamline BL1. Im Rahmen eines BMBF-Projekts mit der TU Berlin wurde dafür im Herbst eine neue Fokussier-Optik für die FEL-Strahlung eingebaut und anschließend die Experimentierkammer installiert und erfolgreich in Betrieb genommen. Die ersten Nutzerexperimente fanden im Dezember 2014 statt und verliefen sehr erfolgreich. Ebenfalls im Dezember fand eine eigene FLASH-Messkampagne zu zeitaufgelöster Photoelektronenbeugung statt, die ebenfalls gute Ergebnisse erzielte. Weitere FEL-Messzeiten der Gruppe fanden wie geplant im Jahr 2014 an der LCLS sowie eine Synchrotron-Messzeit an der ALS statt. Darüber hinaus wurden in Zusammenarbeit mit der AG Rudenko an der Kansas State University Laser- und HHG-Pump-Probe-Experimente vorbereitet, die dort seit Anfang des Jahres 2015 gemeinsam durchgeführt werden.

Der Arbeitsfortschritt befindet sich demnach voll im Zeitplan, wobei ein Teil der ursprünglich in Hamburg geplanten Laseraktivitäten aus gegebenem Anlass (siehe Punkt 11) an der Kansas State University stattfinden.

Wissenschaftlicher Höhepunkt des Jahres war die Veröffentlichung eines Artikels über unsere zeitaufgelösten Experimente an der LCLS in der Zeitschrift *Science* (siehe auch Punkt 8).

5) Finanz-/Zeitplan

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

Auf Grund von veralteten Zahlen für die Gehaltskosten bei der Antragstellung fallen wie im vergangenen Jahr höher als geplante Personalkosten an, so dass der für Investitionen zur Verfügung stehende Betrag geringer ist als ursprünglich vorgesehen. Dies hatte jedoch auch weiterhin keine negativen Auswirkungen auf die Aktivitäten der Gruppe, so dass keine Anpassungen am Zeitplan notwendig sind.

6) Status

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

Aus gegebenem Anlass (siehe Punkt 11) wurden die Verhandlungen mit der Uni Göttingen über die Möglichkeit einer Habilitation nicht weiterverfolgt.

7) Lehrveranstaltungen der/s Nachwuchsgruppenleiters/in

Neben der Betreuung eines Doktorandenseminars am DESY habe ich im Jahr 2014 Lehrveranstaltungen im Rahmen der Hamburger CUI Graduate Days und der Heidelberger Graduiertentage gehalten.

8) Publikationen der Gruppe

Siehe beiliegende Veröffentlichungsliste für das Jahr 2014.

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

Ein Ruf an den Gruppenleiter als „assistant professor“ an die Kansas State University wurde angenommen. Ein zeitgleicher Ruf als „assistant professor“ an die University of Nevada at Reno wurde abgelehnt.

Publications of the Rolles Young Investigator Group in 2014

1. B. Erk, R. Boll, S. Trippel, D. Anielski, L. Foucar, B. Rudek, S.W. Epp, R. Coffee, S. Carron, S. Schorb, K.R. Ferguson, M. Swiggers, J.D. Bozek, M. Simon, T. Marchenko, J. Küpper, I. Schlichting, J. Ullrich, C. Bostedt, **D. Rolles**, and A. Rudenko, *Imaging Charge Transfer in Iodomethane upon X-Ray Photoabsorption*, *Science* **345**, 288-291 (2014).
2. L.F. Gomez, K. Ferguson, J. Cryan, C. Bacellar, R. Mayro Tanyag, C. Jones, S. Schorb, D. Anielski, A. Belkacem, C. Bernando, R. Boll, J. Bozek, S. Carron, G. Chen, T. Delmas, L. Englert, S.W. Epp, B. Erk, L. Foucar, R. Hartmann, A. Hexemer, M. Huth, J. Kwok, S. Leone, F. Maia, E. Malmerberg, S. Marchesini, D. Neumark, B. Poon, J. Prell, **D. Rolles**, B. Rudek, A. Rudenko, M. Seifrid, K. Siefertmann, F. Sturm, M. Swiggers, J. Ullrich, F. Weise, P. Zwart, C. Bostedt, O. Gessner, and A.F. Vilesov, *Shapes and vorticities of superfluid helium nanodroplets*, *Science* **345**, 906-909 (2014).
3. M. F. Hantke, D. Hasse, F.R.N.C. Maia, T. Ekeberg, K. John, M. Svenda, D. Loh, A.V. Martin, N. Timneanu, D.S.D. Larsson, G. van der Schot, G.H. Carlsson, M. Ingelman, J. Andreasson, D. Westphal, M. Liang, F. Stellato, D.P. DePonte, R. Hartmann, N. Kimmel, R.A. Kirian, M.M. Seibert, K. Mühlig, S. Schorb, K. Ferguson, C. Bostedt, S. Carron, J.D. Bozek, **D. Rolles**, A. Rudenko, S. Epp, H.N. Chapman, A. Barty, J. Hajdu, and I. Andersson, *High-throughput imaging of heterogeneous cell organelles with an X-ray laser*, *Nature Photonics* **8**, 943-949 (2014).
4. J. Küpper, S. Stern, L. Holmegaard, F. Filsinger, A. Rouzee, A. Rudenko, P. Johnsson, A. V. Martin, M. Adolph, A. Aquila, S. Bajt, A. Barty, C. Bostedt, J. Bozek, C. Caleman, R. Coffee, N. Coppola, T. Delmas, S. Epp, B. Erk, L. Foucar, T. Gorkhover, L. Gumprecht, A. Hartmann, R. Hartmann, G. Hauser, P. Holl, A. Hömke, N. Kimmel, F. Krasniqi, K.-U. Kühnel, J. Maurer, M. Messerschmidt, R. Moshhammer, C. Reich, B. Rudek, R. Santra, I. Schlichting, C. Schmidt, S. Schorb, J. Schulz, H. Soltau, L. Strüder, J. Thøgersen, M. J. J. Vrakking, G. Weidenspointer, T. A. White, C. Wunderer, G. Meijer, J. Ullrich, H. Stapelfeldt, **D. Rolles**, and H. N. Chapman, *X-ray diffraction from isolated and strongly aligned gas-phase molecules with a free-electron laser*, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 083002 (2014).
5. **D. Rolles**, R. Boll, M. Adolph, A. Aquila, C. Bostedt, J.D. Bozek, H.N. Chapman, R. Coffee, N. Coppola, P. Decleva, T. Delmas, S.W. Epp, B. Erk, F. Filsinger, L. Foucar, L. Gumprecht, A. Hömke, T. Gorkhover, L. Holmegaard, P. Johnsson, Ch. Kaiser, F. Krasniqi, K.-U. Kühnel, J. Maurer, M. Messerschmidt, R. Moshhammer, W. Quevedo, I. Rajkovic, A. Rouzée, B. Rudek, I. Schlichting, C. Schmidt, S. Schorb, C.D. Schröter, J. Schultz, H. Stapelfeldt, M. Stener, S. Stern, S. Techert, J. Thøgersen, M.J.J. Vrakking, A. Rudenko, J. Küpper, and J. Ullrich, *Femtosecond X-Ray Photoelectron Diffraction on Gas-Phase Dibromobenzene Molecules*, *J. Phys. B* **47**, 124035 (2014).
6. L. Fang, T. Osipov, B. F. Murphy, A. Rudenko, **D. Rolles**, V. S. Petrovic, C. Bostedt, J. D. Bozek, P. H. Bucksbaum, and N. Berrah, *Probing ultrafast electronic and molecular dynamics with free-electron lasers*, *J. Phys. B* **47**, 124006 (2014).
7. O. Peyrusse, B. Deschaut and **D. Rolles**, *A superconfiguration approach to multi-electron ionization of Xe under strong x-ray irradiation*, *J. Phys. B* **47**, 011001 (2014).
8. R. Boll, A. Rouzée, M. Adolph, D. Anielski, A. Aquila, S. Bari, C. Bomme, C. Bostedt, J.D. Bozek, H.N. Chapman, L. Christensen, R. Coffee, N. Coppola, S. De, P. Decleva, S.W. Epp, B. Erk, F. Filsinger, L. Foucar, T. Gorkhover, L. Gumprecht, A. Hömke, L. Holmegaard, P. Johnsson, J.S. Kienitz, T. Kierspel, F. Krasniqi, K.-U. Kühnel, J. Maurer, M. Messerschmidt, R. Moshhammer, N.L.M. Müller, B. Rudek, E. Savelyev, I. Schlichting, C. Schmidt, F. Scholz, S. Schorb, J. Schultz, J. Seltmann, M. Stener, S. Stern, S. Techert, J. Thøgersen, S. Trippel, J. Viefhaus, M.J.J. Vrakking, H. Stapelfeldt, J. Küpper, J. Ullrich, A. Rudenko, and **D. Rolles**, *Imaging Molecular Structure through Femtosecond Photoelectron Diffraction on Aligned and Oriented Gas-Phase Molecules*, *Faraday Discussions* **171**, 57-80 (2014).

9. O. Vendrell, J. Küpper, M. Wolf, H. Chapman, M. Chergui, K. Reid, K. von Haefen, R. Moshhammer, G. Williams, A. Tehlar, G. Dixit, H. J. Wörner, J. Underwood, J. Marangos, M. Woerner, C. Bressler, M. Minitti, A. Kirrander, C. Vozzi and **D. Rolles**, *Chemical reaction dynamics I and electron dynamics in molecules: general discussion*, Faraday Discuss. **171**, 145-168 (2014).
10. S. Stern, L. Holmegaard, F. Filsinger, A. Rouzee, A. Rudenko, P. Johnsson, A. V. Martin, A. Barty, C. Bostedt, J. Bozek, R. Coffee, S. Epp, B. Erk, L. Foucar, R. Hartmann, G. Hauser, P. Holl, A. Hömke, N. Kimmel, K.-U. Kühnel, J. Maurer, M. Messerschmidt, B. Rudek, D. Starodub, J. Thøgersen, G. Weidenspointer, T. A. White, H. Stapelfeldt, **D. Rolles**, H. N. Chapman, and J. Küpper, *Towards atomic resolution diffractive imaging of isolated molecules with x-ray free-electron lasers*, Faraday Discussions **171** 393-418 (2014).
11. D. Rolles, R. Boll, S. R. Tamrakar, D. Anielski, C. Bomme, *Femtosecond photoelectron diffraction: a new approach to image molecular structure during photochemical reactions*, Proc. SPIE **9198**, Ultrafast Nonlinear Imaging and Spectroscopy II, 91980O (2014); doi:10.1117/12.2061783.
12. J. Andreasson, A. V. Martin, M. Liang, N. Timneanu, A. Aquila, F. Wang, B. Iwan, M. Svenda, T. Ekeberg, M. Hantke, J. Bielecki, **D. Rolles**, A. Rudenko, L. Foucar, R. Hartmann, B. Erk, B. Rudek, H. N. Chapman, J. Hajdu, and A. Barty, *Automated identification and classification of single particle serial femtosecond X-ray diffraction data*, Opt. Express **22**, 2497-2510 (2014).