

Schlussbericht

<b>Förderinstrument:</b>	<b>Helmholtz-Nachwuchsgruppen</b>
<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 (Förderzeitraum):</b>	01/2013-12/2017

**1. Zusammenfassung (max. 1 DIN A4-Seite)**

*Stellen Sie kurz die wesentlichen Ergebnisse und Fortschritte gegenüber dem Stand des Wissens zum Zeitpunkt der Antragstellung dar und geben Sie einen Ausblick auf mögliche künftige Arbeiten sowie mögliche Anwendungen.*

Zum Zeitpunkt der Antragstellung gab es zwar bereits einige Arbeiten, die zeitaufgelöste Experimente mit Freie-Elektronen Lasern (FELs) an Molekülen beschrieben, die meisten dieser Experimente besaßen jedoch reinen „proof-of-principle“ Charakter. Sie zeigten vor allem, dass solche Experimente prinzipiell möglich sind, ohne dabei jedoch viel neues Wissen über die konkret untersuchte photochemische Fragestellung zu generieren. Fünf Jahre später ist das Feld gereift und hat sich entscheidend weiterentwickelt. Obwohl auch weiterhin neue Methoden entwickelt und mit Hilfe von „proof-of-principle“ Experimenten verifiziert werden, wurden inzwischen auch zahlreiche Arbeiten veröffentlicht (darunter viele, die durch diese Nachwuchsgruppe ermöglicht wurden), in denen mit Hilfe von Pump-Probe Experimenten neue Einblicke in ultraschnelle Prozesse in Molekülen gewonnen wurden, die nur Dank dieser Methoden möglich waren. Darüberhinaus hat insbesondere die neue CAMP End-station am FLASH Freie-Elektronen Laser bei DESY, die im Rahmen dieser Nachwuchsgruppe aufgebaut und betrieben wurde, den experimentellen und logistische Aufwand, der für diese Experimente notwendig ist, entscheidend verringert. Dadurch können nun auch zahlreiche Nutzer-Gruppen, die nicht über die enormen finanziellen und personellen Mittel und das notwendige technische Know-how verfügen, die in der Vergangenheit zur Durchführung solcher Experimente notwendig waren, komplizierte Pump-Probe-Experimente bei FLASH durchführen.

Neben den Fortschritten bzgl. Experimenten mit FELs hat weltweit eine verstärkte Verzahnung der FEL-Experimente mit Labor-Experimenten an Femtosekunden-Lasern und HHG-Quellen stattgefunden, wie dies auch im Rahmen dieser Nachwuchsgruppen vorhergesagt, geplant, und konkret umgesetzt wurde.

Mit Hilfe der neu entwickelten bzw. zur Reife gebrachten Techniken und Methoden ist es nun möglich, ultraschnelle Prozesse in einer Vielzahl von chemisch relevanten Molekülen mit einer Zeitauflösung von unter 100 Femtosekunden zu untersuchen. Zusammen mit den – oft von den Experimenten getriebenen – Fortschritten in der theoretischen Beschreibung dieser Prozesse kann so ein tieferes Verständnis der grundlegenden Reaktionsmechanismen gewonnen werden, das auch für angewandte Forschung von Nutzen sein kann.

**2. Arbeits- und Ergebnisbericht**

**a) Ausgangslage (max. 1 DIN A4-Seite)**

*Stellen Sie Ausgangsfrage, Zielsetzung und Arbeitshypothesen des Projekts dar.*

Das Projekt dieser Nachwuchsgruppe war vor allem motiviert durch die erfolgreichen, ersten zeitaufgelösten Experimente an den Freie-Elektronen Laser FLASH am DESY und LCLS am SLAC in Stanford, die den langjährigen Traum, chemische Reaktionen in einzelnen Molekülen mit Femtosekunden-Zeit- und atomarer Ortsauflösung zu „filmen“, in greifbare Nähe rücken ließen. Unter Verwendung der dabei entwickelten experimentellen Methoden, etwa zeitaufgelöste Photoelektronenbeugung und -spektroskopie, Coulomb Explosion Imaging sowie Elektron-Ion Koinzidenzspektroskopie, sollten die Kern- und Elektronendynamik während photochemischen Reaktionen mit Hilfe von Femtosekunden-Pump-Probe-Experimenten verfolgt und sichtbar gemacht werden. Ziel dieser im Grenzbereich zwischen der Atom- und Molekülphysik sowie der Chemie angesiedelten Experimente war und ist es unter anderem, Einblicke in den Ablauf von Isomerisationsprozessen und in die Dynamik an sogenannten „conical intersections“ zu liefern und dadurch unser Verständnis von chemischen Reaktionsmechanismen zu testen und zu vertiefen. Zu diesem Zweck sollten im Rahmen der Nachwuchsgruppe die zum „Filmen“ von chemischen Reaktionen notwendigen experimentellen Techniken etabliert und weiterentwickelt werden, um damit dann Beispielreaktionen von chemischer Relevanz untersuchen und ihre Reaktionspfade ergründen zu können. Eine weitere Arbeitshypothese des Projekts, abgesehen von den großen Erwartungen, die in die Weiterentwicklung und Anwendung von FEL-Experimenten gesetzt wurden, bestand in der Annahme, dass diese Experimente mittelfristig nur dann erfolgreich sein können, wenn sie in enger Verzahnung mit Experimenten an Laborlichtquelle wie Femtosekunden-Lasern und HHG-Quellen sowie mit Synchrotron-Strahlungsquellen der dritten Generation (u.a. PETRA III, ALS, SOLEIL, etc) durchgeführt werden.

**b) Darstellung der erzielten Ergebnisse (max. 4 DIN A4-Seiten)**

*Beschreiben Sie den wissenschaftlichen bzw. technischen Erfolg des Vorhabens inkl. erreichter Nebenergebnisse und wesentlicher Erfahrungen. Ordnen Sie die Arbeiten in das nationale und internationale Umfeld ein.*

Im Rahmen des Vorhabens wurden über 20 Experimente an den Freie-Elektronen Lasern FLASH und LCLS, über 10 Experimente an den Synchrotron-Strahlungsquellen PETRA II und der ALS, sowie zahlreiche Experimente mit Femtosekunden-Lasern und HHG-Quellen durchgeführt, von denen etwa die Hälfte von Wissenschaftlern der Nachwuchsgruppe geleitet wurden. Wissenschaftlicher Höhepunkte waren unter anderem die Veröffentlichung eines Artikels über unsere zeitaufgelösten Experimente an der LCLS in der Zeitschrift *Science* im Jahr 2014 (Nr. 15 in der Veröffentlichungsliste), in der der intramolekulare Ladungstransfer in dissoziierenden Methylidid-Molekülen charakterisiert und quantifiziert werden und damit die Frage beantwortet werden konnte, bis zu welchem internuklearen Abstand sich ein „zerbrechendes“ Molekül „wie ein Molekül verhält“. In zwei im Jahr 2015 und 2016 in *Nature Communication* veröffentlichten Artikeln (Nr. 28 und 35 in der Veröffentlichungsliste) konnte dank des entscheidenden Beitrag von experimentellem Know-how unserer Gruppe gezeigt werden, dass mit Hilfe von mehrfach-koinzidenter, impuls-aufgelöster Messung von Molekülfragmenten durch Innerschalen-Anregung ausgelöste Isomerisierungs- bzw. Dissoziationsreaktionen mit einer Zeitauflösung von wenigen 10 Femtosekunden untersucht und sowohl räumlich als auch zeitlich abgebildet werden können. Und schließlich konnten wir in einer Veröffentlichung aus dem Jahr 2017 in der Zeitschrift *Nature* (Nr. 44 in der Veröffentlichungsliste) über eine unerwartet starke Absorption von hoch-intensiver Strahlung im harten Röntgenbereich durch Moleküle berichten, die ein Atom mit hoher Ordnungszahl enthalten, wie dies z.B. in vielen biologisch relevanten Proben, wie z.B. Proteinen, der Fall ist. Da solche Proben in jüngster Zeit verstärkt auch mit Hilfe von Femtosekunden-Röntgenbeugung an FELs untersucht werden, ist diese Erkenntnis von entscheidender Bedeutung, u.a. für die Modellierung von Strahlenschäden in solchen Beugungsexperimenten.

Neben diesen entscheidenden wissenschaftlichen Durchbrüchen und vielen anderen neuen wissenschaftlichen Erkenntnissen und Errungenschaften, die hier nicht weiter in Detail

diskutiert werden sollen, aber in den insgesamt 56 veröffentlichten und 4 eingereichten Artikeln in Fachzeitschriften, die aus der Arbeit der Nachwuchsgruppe resultieren, dargestellt sind, ist ein weiterer entscheidender Erfolg und ein wichtiges Ergebnis dieser Nachwuchsgruppe der erfolgreiche Aufbau und Betrieb des „CAMP“-Messplatzes an Strahlrohr BL1 des FLASH Freie-Elektronen Lasers. Im Rahmen eines BMBF-Projekts mit der TU Berlin wurde dafür eine neue Fokussier-Optik für die FEL-Strahlung in das Strahlrohr eingebaut und anschließend die in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft entwickelte Experimentierkammer installiert und erfolgreich in Betrieb genommen. Seit Ende 2014 steht diese Apparatur allen Nutzern der FLASH-Facility über den üblichen Weg von Messzeit-Anträgen zur Verfügung und hat sich sozusagen „aus dem Stand“ als am häufigsten nachgefragter Messplatz bei FLASH etabliert. Bis zum Ende der Laufzeit dieser Nachwuchsgruppe wurde der Nutzerbetrieb bei CAMP von Wissenschaftlern der Nachwuchsgruppe im 24-Stunden-Messzeitbetrieb betreut und der experimentelle Aufbau dabei weiterhin stetig weiterentwickelt und verbessert. Dank des starken wissenschaftlichen Profils der Nachwuchsgruppe waren auch mehrere eigene Messzeitanträge der Gruppe erfolgreich, so dass CAMP im Zusammenspiel mit den Messungen an anderen Facilities auch integraler Bestandteil unsere eigenen Forschung war und entscheidend dazu beigetragen hat, dass das Ziel des Projekts, Pump-Probe-Experimente an Molekülen mit FELs als gängige Methode zu etablieren, erfolgreich umgesetzt werden konnte.

Obwohl die Veröffentlichung von an FELs erzielten Forschungsergebnissen wegen der sehr zeitaufwändigen und komplexen Auswertung oft mehrere Jahre in Anspruch nimmt, sind zum Zeitpunkt dieses Berichts schon sieben an CAMP durchgeführte Arbeiten veröffentlicht und zwei weitere eingereicht, und es steht zu erwarten, dass in den nächsten ein bis zwei Jahren noch zahlreiche Veröffentlichung hinzukommen werden, die auf während der Laufzeit der Nachwuchsgruppe durchgeführten Messzeiten beruhen.

Wichtige wissenschaftliche Erkenntnisse und Entwicklungen innerhalb unseres Projekts konnten auch durch regelmäßige Messzeiten an den Synchrotron-Quellen PETRA III am DESY, der ALS in Berkeley (USA) und SOLEIL (Frankreich) erzielt werden, die größtenteils von Mitgliedern der Nachwuchsgruppe koordiniert und in diversen nationalen und internationalen Kollaborationen durchgeführt wurden. Aus diesen Messzeiten resultieren zum Teil oder im Ganzen u.a. die Arbeiten Nr. 22, 25, 34, 45, 48 und 49 in der Veröffentlichungsliste sowie die eingereichte Veröffentlichung Nr. 1.

Bedingt durch meinen Ruf an die Kansas State University und meinen Umzug in die USA im Sommer 2015 wurden die Mehrzahl der im Rahmen des Nachwuchsgruppenprojekts geplanten Laser- und HHG-Pump-Probe-Experimente nicht, wie ursprünglich vorgeschlagen, in Hamburg sondern statt dessen an der Kansas State University aufgebaut und durchgeführt, zum Teil jedoch auch unter Einbeziehung der Hamburger Nachwuchsgruppe. Eine erwähnenswerte Ausnahme war eine ein-monatige Messkampagne am HI Jena, in der zusammen mit den Kollegen aus Jena und zwei weiteren Arbeitsgruppen am DESY (AG Küpper und AG Laarmann) unter der Führung der Nachwuchsgruppe Rolles Elektron-Ionen-Koinzidenz-Experimente mit einer in Jena entwickelten HHG-Quelle mit extrem hoher Repetitionsrate durchgeführt wurden (s. Nr. 38 in der Veröffentlichungsliste).

Insgesamt wurden mit Ausnahme von ersten Experimenten am European XFEL, die wegen Verzögerungen bei dessen Inbetriebnahme nicht mehr innerhalb der Laufzeit der Arbeitsgruppe durchgeführt werden konnten (aber mit Beteiligung von mehreren ehemaligen Wissenschaftlern der Nachwuchsgruppe für Ende diesen Jahres geplant sind), alle im Antrag der Nachwuchsgruppe aufgeführten Meilensteine wie geplant erreicht und alle wissenschaftlichen Ziele umgesetzt. Darüber konnte sich die Nachwuchsgruppe national und international als eine der führenden Gruppen im Bereich zeitaufgelöster Experimente mit Freie-Elektronen Lasern etablieren, wie mehrere Review Artikel (Nr. 7, 20, 30, 54 in der Veröffentlichungsliste), eine lange Reihe von Veröffentlichungen in high-profile Journalen (8 Artikel in Journalen der *Nature* Familie, 2 in *Science* und 5 in *PRL*) und zahlreiche eingeladenen Vorträge auf nationalen und internationalen Konferenzen für alle

Wissenschaftler der Nachwuchsgruppe (nicht nur für den Gruppenleiter!) bezeugen.

**c) Ausblick auf zukünftige Arbeiten, Nachhaltigkeit (max. 2 DIN A4-Seiten)**

*Haben sich während der Projektlaufzeit unerwartete Effekte oder Fragestellungen ergeben, für deren Klärung weitergehender Forschungsbedarf besteht? Sind weiterführende Arbeiten, ggf. auch andernorts oder in anderer Konstellation geplant?*

Die Arbeiten der Nachwuchsgruppe stellen nur einen Anfang für viele weitere Forschungsprojekte und Fragestellungen da, die sich auf Grund der vorherigen Arbeiten ergeben haben oder sich auf Basis der von der Arbeitsgruppe geleisteten Entwicklungen nun bearbeiten lassen. Wissenschaftlich betrachtet ist das Feld der „ultraschnellen Röntgenforschung“ (*ultrafast X-ray science*) sicher immer noch in einem Frühstadium, und neue technische Entwicklungen, wie z.B. die Inbetriebnahme von FELs mit hoher Repetitionsrate (European XFEL, LCLS-II) oder die Erzeugungen von Attosekunden-Röntgenpulsen mit FELs werden dem Feld weiter großen Auftrieb verleihen und zu steilem Wachstum führen. Durch viele Kollaborationen und Vernetzungen, die im Rahmen der Arbeit der Nachwuchsgruppe entstanden sind, bin sowohl ich selber als auch die meisten meiner ehemaligen Mitarbeiter in viele dieser Projekte eingebunden, und ich plane, diese Art der Forschung als eines der zentralen Themen meiner neuen Arbeitsgruppe an der Kansas State University intensiv weiterzuverfolgen.

Lokal am DESY ist durch die Existenz der CAMP-Apparatur bei FLASH ein hohes Maß an Kontinuität und Nachhaltigkeit gegeben, was durch die befristete Einstellung meines ehemaligen Postdocs, Dr. Benjamin Erk, als neuen Hauptverantwortlichen für CAMP zumindest vorläufig gesichert wurde. Langfristig bleibt zu hoffen, dass auch in Zukunft, d.h. mehrere Jahre nach dem Ende der Nachwuchsgruppe, die personellen und finanziellen Mittel zur Verfügung stehen werden, um einerseits den Betrieb und die ständige Weiterentwicklung von CAMP zu gewährleisten und andererseits den zuständigen Wissenschaftlern auch ein daran angeknüpftes, wissenschaftliches in-house Forschungsprogramm zu ermöglichen.

**d) Anwendungs-/Verwertungspotenzial (max. 2 DIN A4-Seiten)**

*Wie bewerten Sie selbst das Anwendungs- bzw. Verwertungspotenzial der erreichten Ergebnisse? Wo sehen Sie in der Zukunft Möglichkeiten? Beschreiben Sie erfolgte oder geplante Verwertungsmaßnahmen. Machen Sie dabei bitte auch Angaben zu Patenten, Lizenzen, Industriekooperationen etc.*

Die Forschungsergebnisse liegen zu 100% im Bereich der Grundlagenforschung, und ich sehe kein direktes Verwertungspotential.

**3. Qualifikation des wissenschaftlichen Nachwuchses (max. 2 DIN A4-Seiten)**

*Beschreiben Sie die Struktur der Nachwuchsgruppe im Verlauf des Förderzeitraums und die wesentlichen Qualifikationserfolge (einschließlich Ihrer Person): Bachelor, Master, Diplome, Promotionen, Habilitationen, Berufung/Juniorprofessur, Tenure Track, Preise etc., Besonderheiten und Ihre berufliche Planung nach Auslaufen der Förderung.*

Die Nachwuchsgruppe startete am 01.01.2013 mit mir als Gruppenleiter, einem Post-Doc (Dr. Benedikt Rudek), sowie zwei von der MPG bezahlten Doktoranden (Rebecca Boll und Denis Anielski), die ich aus meiner vorherigen Max-Planck Arbeitsgruppe übernehmen konnte. Der ebenfalls von der Max-Planck Arbeitsgruppe übernommene Post-Doc schied, wie geplant, zum 31.03.2013 aus, um eine wissenschaftliche Stelle bei der PTB anzutreten. Zum 01.02. und 01.04.2013 konnte ich jeweils einen neuen Post-Doc anstellen. Diese beiden Post-Docs (Dr. Benjamin Erk und Dr. Cédric Bomme) blieben jeweils bis zum Ende der Nachwuchsgruppe bzw. bis fast zu deren Ende in der Gruppe, und einer von ihnen (Dr. Benjamin Erk) ist nun weiterhin am DESY als neuer Hauptverantwortlicher für die CAMP

End-station beschäftigt, während der andere eine wissenschaftliche Stelle in Frankreich angetreten hat. Eine der beiden „MPG-Doktoranden“, Rebecca Boll, promovierte im Sommer 2014 und arbeitete danach als Post-Doktorandin in der Arbeitsgruppe Techert am DESY weiterhin eng mit der Nachwuchsgruppe zusammen, bevor sie im letzten Jahr eine wissenschaftliche Stelle am European XFEL antrat. Der zweite Doktorand konnte leider seine Arbeit aus persönlichen Gründen nicht abschliessen. Im Dezember 2013 begann ein neuer Doktorand, Evgeny Savelyev, der über die Uni Göttingen finanziert wurde und der seine Arbeit leider auch noch nicht abgeschlossen hat.

Neben den festen Mitgliedern der Nachwuchsgruppe waren im Sommer 2013 und 2014 jeweils zwei Sommerstudenten für zwei bzw. drei Monate in der Gruppe beschäftigt, und im Herbst 2013 wurde für 3 Wochen ein Schülerpraktikant betreut. Von Oktober 2015 bis Ende März 2016 war außerdem ein Masterstudent der Uni Oldenburg, Samyak Tamrakar, als HiWi in der Gruppe beschäftigt, und im Frühjahr 2017 fertigte eine Studentin der Uni Hamburg, Helena Gleißner) ihre Bachelorarbeit in der Gruppe an und verbrachte danach zwei weitere Monate als Sommerstudentin in meiner Arbeitsgruppe an der Kansas State University. Da ich selber im Jahr 2014 einen Ruf als „assistant professor“ an die Kansas State University erhalten und im Sommer 2015 die Stelle in Kansas angetreten habe, fehlte der Gruppe ab diesem Zeitpunkt eine wichtige Person zu Betreuung der CAMP-Aktivitäten am FLASH und ich konnte aushandeln, dass von den frei werdenden Mitteln für meine Stelle ein weiterer Post-Doc, Dr. Dimitrios Rompotis, eingestellt werden konnte, der bis zum Ende der Laufzeit in der Nachwuchsgruppe war und dann zur XFEL GmbH gewechselt ist.

#### **4. Öffentlichkeitsarbeit**

*Welche Maßnahmen zur Öffentlichkeitsarbeit wurden ergriffen (z.B. Erfolgsberichte in den Medien, eigene Website)?*

Die Nachwuchsgruppe besaß eine eigene Webseite als eine der Forschungsgruppen im Bereich Photon Science am DESY und berichtete regelmäßig durch Beiträge im DESY Jahresbericht. Mehrere der „*high-profile*“ Publikationen wurden als Photon Science Highlights ausgewählt und besonders hervorgehoben. Sie wurden außerdem über Pressemitteilungen der DESY PR-Abteilung für die breitere Öffentlichkeit aufbereitet und z.T. auch von der Tagespresse (z.B. Hamburger Abendblatt) sowie diversen Online-Medien aufgegriffen. Insbesondere unsere Veröffentlichung aus dem Jahr 2017 in der Zeitschrift *Nature* erfuhr als „molekulares Schwarzes Loch“ sowohl national als auch international eine starke Medienaufmerksamkeit.

#### **5. Vernetzung**

*Wie hat sich die Vernetzung der Nachwuchsgruppe innerhalb des Helmholtz-Zentrums bzw. der Universität entwickelt? Wie zufrieden sind Sie mit der Zusammenarbeit mit dem Zentrum bzw. der Universität?*

Innerhalb des Helmholtz-Zentrums war die Nachwuchsgruppe in der Abteilung Photon Science – FLASH (FS-FL) angesiedelt und durch den Betrieb der CAMP End-Station eng mit dem Tagesgeschäft bei FLASH verknüpft. Dennoch ermöglichte die Finanzierung als Nachwuchsgruppe eine starke wissenschaftliche Eigenständigkeit der Gruppe, was sowohl für die Motivation als auch für die Vielzahl an wissenschaftlichen Projekten überaus wichtig war. Darüber hinaus war die Gruppe mit dem Center for Free-Electron Laser Science (CFEL) assoziiert, wo wir mit einigen Arbeitsgruppen in enger Kollaboration stehen. An der Uni Göttingen war die Gruppe im Rahmen einer Brückenvereinbarung zwischen DESY und dem Göttingen Research Campus unter der Führung von Prof. Simone Techert innerhalb der SFB 755 wissenschaftlich eingebunden, was sich durch den über Göttingen finanzierten Doktoranden und die gemeinsame Post-Doktorandin auch personell

widerspiegelte. Insbesondere zu Beginn der Nachwuchsgruppe habe ich auch an mehreren SFB-Seminaren und Begutachtungen in Göttingen teilgenommen und zusammen mit Simone Techert eine Lehrveranstaltung für Studenten aus Göttingen angeboten. Nach meinem Wechsel an die Kansas State University habe ich meine eigenen Aktivitäten an der Uni Göttingen auf Grund meines Umzugs eingestellt, die enge Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Prof. Simone Techert fand jedoch weiterhin statt.

Insgesamt war ich sehr zufrieden mit der Vernetzung und der unkomplizierten Zusammenarbeit mit DESY und der Uni Göttingen. Ich bin sehr dankbar für die stetige Unterstützung von beiden Seiten, die für den Erfolg der Nachwuchsgruppe von großer Wichtigkeit war.

## 6. Publikationen (Auflistung)

Artikel in Fachzeitschriften, Kongressbeiträge, sonstige Publikationen

### Veröffentlichungen in Fachzeitschriften (geordnet nach Jahren)

Mitglieder der Nachwuchsgruppe sind **fett gedruckt**

#### 2013:

1. **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).
2. 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).
3. 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).
4. **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. Rouzee, 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).
5. 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).
6. **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).
7. **D. Rolles**, *Trendbericht Physikalische Chemie 2012: Molekülkino – Experimente mit Freie-*

8. 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).
9. 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).
10. 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).
11. 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).
12. 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).
13. 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).
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).

**2014:**

15. **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).
16. 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).
17. 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).
18. 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).
19. **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).
20. 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).
21. 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).
22. **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. Viehhaus, 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).

23. O. Vendrell, J. Küpper, M. Wolf, H. Chapman, M. Chergui, K. Reid, K. von Haeften, 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).
24. 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).
25. **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.
26. 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).

**2015:**

27. R.M.P. Tanyag, C. Bernando, C.F. Jones, C. Bacellar, K.R. Ferguson, **D. Anielski, R. Boll, S. Carron, J.P. Cryan, L. Englert, S. W. Epp, B. Erk, L. Foucar, L.F. Gomez, R. Hartmann, D.M. Neumark, D. Rolles, B. Rudek, A. Rudenko, K.R. Siefertmann, J. Ullrich, F. Weise, C. Bostedt, O. Gessner, A.F. Vilesov**, *X-ray coherent diffractive imaging by immersion in nanodroplets*, [Struct. Dyn. \*\*2\*\*, 051102 \(2015\)](#).
28. C. E. Liekhus-Schmaltz, I. Tenney, T. Osipov, A. Sanchez-Gonzalez, N. Berrah, **R. Boll, C. Bomme**, C. Bostedt, J.D. Bozek, S. Carron, R. Coffee, J. Devin, B. Erk, K.R. Ferguson, R.W. Field, L. Foucar, L.J. Frasinski, J.M. Glowina, M. Gühr, A. Kamalov, J. Krzywinski, H. Li, J.P. Marangos, T.J. Martinez, B.K. McFarland, S. Miyabe, B. Murphy, A. Natan, **D. Rolles**, A. Rudenko, M. Siano, E.R. Simpson, L. Spector, M. Swiggers, D. Walke, S. Wang, T. Weber, P.H. Bucksbaum, V.S. Petrovic, *Ultrafast Isomerization Initiated by X-Ray Core Ionization*, [Nature Commun. \*\*6\*\*, 8199 \(2015\)](#).
29. T. Kierspel, J. Wiese, T. Mullins, J. Robinson, A. Aquila, A. Barty, R. Bean, **R. Boll, S. Boutet, P. Bucksbaum, H.N. Chapman, L. Christensen, A. Fry, M. Hunter, J.E. Koglin, M. Liang, V. Mariani, A. Morgan, A. Natan, V. Petrovic, D. Rolles, A. Rudenko, K. Schnorr, H. Stapelfeldt, S. Stern, J. Thøgersen, C.H. Yoon, F. Wang, S. Trippel, J. Küpper**, *Strongly aligned gas-phase molecules at Free-Electron Lasers*, [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. \*\*48\*\*, 204002 \(2015\)](#).
30. A. Rudenko and **D. Rolles**, *Time-resolved studies with FELs*, [J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. \*\*204\*\*, 228-236 \(2015\)](#).
31. K. Schnorr, A. Senftleben, G. Schmid, S. Augustin, M. Kurka, A. Rudenko, L. Foucar, A. Broska, 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, T. Pfeifer, C.D. Schröter, R. Moshhammer, *Time-Resolved Study of ICD in Ne Dimers Using FEL Radiation*, [J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. \*\*204\*\*, 245-256 \(2015\)](#).
32. T. Ekeberg, M. Svenda, C. Abergel, F. R. N. C. Maia, V. Seltzer, J.-M. Claverie, M. Hantke, O. Jönsson, C. Nettelblad, G. van der Schot, M. Liang, D. P. DePonte, A. Barty, M. M. Seibert, B. Iwan, I. Andersson, N.-T. D. Loh, A. V. Martin, H. N. Chapman, C. Bostedt, J. D. Bozek, K. R. Ferguson, J. Krzywinski, S. W. Epp, **D. Rolles**, A. Rudenko, R. Hartmann, N. Kimmel and J. Hajdu, *Three-dimensional reconstruction of the giant mimivirus particle with an X-ray free-*

*electron laser*, [Phys. Rev. Lett. \*\*114\*\*, 098102 \(2015\)](#).

33. G. van der Schot, M. Svenda, F.R.N.C. Maia, M. Hantke, D.P. DePonte, M.M. Seibert, A. Aquila, J. Schulz, R. Kirian, M. Liang, F. Stellato, B. Iwan, J. Andreasson, N. Timneanu, D. Westphal, F. Nunes Almeida, D. Odic, D. Hasse, G.H. Carlsson, D.S.D. Larsson, A. Barty, A.V. Martin, S. Schorb, C. Bostedt, J.D. Bozek, **D. Rolles**, A. Rudenko, S. Epp, L. Foucar, B. Rudek, R. Hartmann, N. Kimmel, P. Holl, L. Englert, N.-T.D. Loh, H. Chapman, I. Andersson, J. Hajdu, and T. Ekeberg, *Imaging Single Cells in a Beam of Live Cyanobacteria with an X-ray Laser*, [Nature Commun. \*\*6\*\*, 5704 \(2015\)](#).

**2016:**

34. U. Ablikim, **C. Bomme**, H. Xiong, **E. Savelyev**, R. Obaid, B. Kaderiya, S. Augustin, K. Schnorr, I. Dumitriu, T. Osipov, R. Bilodeau, D. Kilcoyne, V. Kumarapan, A. Rudenko, N. Berrah, **D. Rolles**, *Separation of cis and trans geometric isomers by Coulomb Explosion Imaging*, [Scientific Reports \*\*6\*\*, 38202 \(2016\)](#).
35. A. Picon, C. S. Lehmann, C. Bostedt, A. Rudenko, A. Marinelli, T. Osipov, **D. Rolles**, N. Berrah, **C. Bomme**, M. Bucher, G. Doumy, **B. Erk**, K. Ferguson, T. Gorkhover, P. J. Ho, E. P. Kanter, B. Krässig, J. Krzywinski, A. A. Lutman, A. M. March, D. Ray, L. Young, S. T. Pratt, D. Moonshiram, and S. H. Southworth, *Hetero-site-specific ultrafast intramolecular dynamics*, [Nat. Commun. \*\*7\*\*, 11652 \(2016\)](#).
36. T. Gorkhover, S. Schorb, R. Coffee, M. Adolph, L. Foucar, D. Rupp, A. Aquila, J. D. Bozek, S. W. Epp, **B. Erk**, L. Gumprecht, L. Holmegaard, A. Hartmann, R. Hartmann, G. Hauser, P. Holl, A. Hömke, N. Kimmel, K.-U. Kühnel, P. Johnsson, M. Messerschmidt, C. Reich, A. Rouzée, B. Rudek, C. Schmidt, J. Schulz, H. Soltau, S. Stern, G. Weidenspointner, B. White, J. Küpper, L. Strüder, I. Schlichting, J. Ullrich, **D. Rolles**, A. Rudenko, T. Möller, and C. Bostedt, *Femtosecond and nanometer visualization of structural dynamics in superheated nanoparticles*, [Nature Photon. \*\*10\*\*, 93-97 \(2016\)](#).
37. **R. Boll**, **B. Erk**, R. Coffee, S. Trippel, T. Kierspel, **C. Bomme**, J.D. Bozek, M. Burkett, S. Carron, K. R. Ferguson, L. Foucar, J. Küpper, T. Marchenko, C. Miron, M. Patanen, T. Osipov, S. Schorb, M. Simon, M. Swiggers, S. Techert, K. Ueda, C. Bostedt, **D. Rolles**, and A. Rudenko, *Charge transfer in dissociating iodomethane and fluoromethane molecules ionized by intense femtosecond X-ray pulses*, [Struct. Dyn. \*\*3\*\*, 043207 \(2016\)](#).
38. J. Rothhardt, S. Hädrich, Y. Shamir, M. Tschernajew, R. Klas, A. Hoffmann, G. K. Tadesse, A. Klenke, T. Gottschall, T. Eidam, J. Limpert, A. Tünnemann, **R. Boll**, **C. Bomme**, **H. Dachraoui**, **B. Erk**, M. Di Fraia, D.A. Horke, T. Kierspel, T. Mullins, A. Przystawik, **E. Savelyev**, J. Wiese, T. Laarmann, J. Küpper, **D. Rolles**, *High-repetition-rate and high-photon-flux 70 eV high-harmonic source for coincidence ion imaging of gas-phase molecules*, [Optics Express \*\*24\*\*, 18133-18147 \(2016\)](#).
39. C. S. Lehmann, A. Picon, C. Bostedt, A. Rudenko, A. Marinelli, D. Moonshiram, T. Osipov, **D. Rolles**, N. Berrah, **C. Bomme**, M. Bucher, G. Doumy, **B. Erk**, K. Ferguson, T. Gorkhover, P. J. Ho, E. P. Kanter, B. Krässig, J. Krzywinski, A. A. Lutman, A. M. March, D. Ray, L. Young, S. T. Pratt, and S. H. Southworth, *Ultrafast x-ray-induced nuclear dynamics in diatomic molecules using femtosecond x-ray-pump – x-ray-probe spectroscopy*, [Phys. Rev. A \*\*94\*\*, 013426 \(2016\)](#).
40. C. F. Jones, C. Bernando, R.M.P. Tanyag, C. Bacellar, K.R. Ferguson, L.F. Gomez, **D. Anielski**, A. Belkacem, **R. Boll**, J. D. Bozek, S. Carron, J.P. Cryan, L. Englert, S. W. Epp, **B. Erk**, L. Foucar, R. Hartmann, D.M. Neumark, **D. Rolles**, A. Rudenko, K.R. Siefertmann, F. Weise, B. Rudek, F.P. Sturm, J. Ullrich, C. Bostedt, O. Gessner, A.F. Vilesov, *Coupled motion of Xe clusters and quantum vortices in He nanodroplets*, [Phys. Rev. B \*\*93\*\*, 180510\(R\) \(2016\)](#).
41. G. van der Schot, M. Svenda, F.R.N.C. Maia, M. Hantke, D.P. DePonte, M.M. Seibert, A. Aquila, J. Schulz, R. Kirian, M. Liang, F. Stellato, S. Bari, B. Iwan, J. Andreasson, N. Timneanu, J. Bielecki, D. Westphal, F. Nunes de Almeida, D. Odic, D. Hasse, G.H. Carlsson, D.S.D. Larsson, A. Barty, A.V. Martin, S. Schorb, C. Bostedt, J.D. Bozek, S. Carron, K. Ferguson, **D. Rolles**, A. Rudenko, S. Epp, L. Foucar, B. Rudek, **B. Erk**, R. Hartmann, N. Kimmel, P. Holl, L.

Englert, N.-T.D. Loh, H.N. Chapman, I. Andersson, J. Hajdu, and T. Ekeberg, *Open data set of live cyanobacteria cells imaged using an X-ray Laser*, [Scientific Data 3, 160058 \(2016\)](#).

42. M. F. Hantke, D. Hasse, 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, B. Iwan, C. Uetrecht, J. Bielecki, M. Liang, F. Stellato, D.P. DePonte, S. Bari, 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, L. Foucar, S.W. Epp, H.N. Chapman, A. Barty, I. Andersson, J. Hajdu, and F.R.N.C. Maia, *A data set from flash X-ray imaging of carboxysomes*, [Scientific Data 3, 160061 \(2016\)](#).
43. T. Ekeberg, M. Svenda, M. M. Seibert, C. Abergel, F. R. N. C. Maia, V. Seltzer, D. P. DePonte, A. Aquila, J. Andreasson, B. Iwan, O. Jönsson, D. Westphal, D. Odic, I. Andersson, A. Barty, M. Liang, A. V. Martin, L. Gumprecht, H. Fleckenstein, S. Bajt, M. Barthelmess, N. Coppola, J.-M. Claverie, N.-T. D. Loh, C. Bostedt, J. D. Bozek, J. Krzywinski, M. Messerschmidt, M.J. Bogan, C.Y. Hampton, R. Sierra, M. Frank, R. Shoeman, L. Lomb, L. Foucar, S. W. Epp, **D. Rolles**, A. Rudenko, R. Hartmann, A. Hartmann, N. Kimmel, P. Holl, G. Weidenspointner, B. Rudek, **B. Erk**, S. Kassemeyer, I. Schlichting, L. Strüder, J. Ullrich, C. Schmidt, F. Krasniqi, G. Hauser, C. Reich, H. Soltau, S. Schorb, H. Hirsemann, C. Wunderer, H. Graafsma, H. N. Chapman, and J. Hajdu, *Single-shot diffraction data from the Mimivirus using an X-ray free-electron laser*, [Scientific Data 3, 160060 \(2016\)](#).

**2017:**

44. A. Rudenko, L. Inhester, K. Hanasaki, X. Li, S.J. Robotjazi, **B. Erk**, **R. Boll**, K. Toyota, Y. Hao, O. Vendrell, **C. Bomme**, **E. Savelyev**, B. Rudek, L. Foucar, S.H. Southworth, C.S. Lehmann, B. Kraessig, T. Marchenko, M. Simon, K. Ueda, K.R. Ferguson, M. Bucher, T. Gorkhover, S. Carron, R. Alonso-Mori, J.E. Koglin, J. Correa, G.J. Williams, S. Boutet, L. Young, C. Bostedt, S.-K. Son, R. Santra, and **D. Rolles**, *Femtosecond response of polyatomic molecules to ultra-intense hard X-rays*, [Nature 546, 129-132 \(2017\)](#).
45. U. Ablikim, **C. Bomme**, **E. Savelyev**, H. Xiong, R. Kushawaha, **R. Boll**, K. Amini, T. Osipov, D. Kilcoyne, A. Rudenko, N. Berrah, **D. Rolles**, *Isomer-Dependent Fragmentation Dynamics of Inner-Shell Photoionized Difluoroiodobenzene*, [Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 13419 \(2017\)](#).
46. K. Amini, **R. Boll**, A. Lauer, M. Burt, J.W.L. Lee, L. Christensen, F. Brauße, T. Mullins, **E. Savelyev**, U. Ablikim, N. Berrah, C. Bomme, S. Düsterer, **B. Erk**, H. Höppner, P. Johnsson, T. Kierspel, F. Krecinic, J. Küpper, E. Müller, M. Müller, H. Redlin, A. Rouzée, N. Schirmel, J. Thørgersen, S. Techert, S. Toleikis, R. Treusch, S. Trippel, A. Ulmer, J. Wiese, C. Vallance, A. Rudenko, H. Stapelfeldt, M. Brouard, **D. Rolles**, *Alignment, Orientation, and Coulomb Explosion of Difluoroiodobenzene Studied with the Pixel Imaging Mass Spectrometry (PImMS) Camera*, [J. Chem. Phys. 147, 013933 \(2017\)](#).
47. **E. Savelyev**, **R. Boll**, **C. Bomme**, N. Schirmel, H. Redlin, **B. Erk**, S. Düsterer, E. Müller, H. Höppner, S. Toleikis, J. Müller, M.K. Czwalinna, R. Treusch, T. Kierspel, T. Mullins, S. Trippel, J. Wiese, J. Küpper, F. Brauße, F. Krecinic, A. Rouzée, P. Rudawski, P. Johnsson, K. Amini, A. Lauer, M. Burt, M. Brouard, L. Christensen, J. Thørgersen, H. Stapelfeldt, N. Berrah, M. Müller, A. Ulmer, S. Techert, A. Rudenko, **D. Rolles**, *Jitter-Correction for IR/UV-XUV Pump-Probe Experiments at the FLASH Free-Electron Laser*, [New J. Phys. 19, 043009 \(2017\)](#).
48. I. Dumitriu, R. C. Bilodeau, T. W. Gorczyca, C. W. Walter, N. D. Gibson, **D. Rolles**, Z. D. Pešić, A. Aguilar, and N. Berrah, *Inner-Shell Photodetachment from Ni<sup>-</sup>: A giant Feshbach resonance*, [Phys. Rev. A 96, 023405 \(2017\)](#).
49. H. Xiong, R. Obaid, L. Fang, **C. Bomme**, N. G. Kling, U. Ablikim, V. Petrovic, C. E. Liekhus-Schmaltz, H. Li, R. C. Bilodeau, T. Wolf, T. Osipov, **D. Rolles**, N. Berrah, *Soft X-ray induced ionization and fragmentation dynamics of Sc<sub>3</sub>N@C<sub>80</sub> investigated using an ion-ion coincidence momentum imaging technique*, [Phys. Phys. A 96, 033408 \(2017\)](#).
50. M. Burt, **R. Boll**, J.W.L. Lee, K. Amini, H. Köckert, C. Vallance, A. S. Gentleman, S. R. Mackenzie, S. Bari, **C. Bomme**, S. Düsterer, **B. Erk**, B. Manschwetus, E. Müller, **D. Rompotis**,

**E. Savelyev**, N. Schirmel, S. Techert, R. Treusch, J. Küpper, S. Trippel, J. Wiese, H. Stapelfeldt, B. Cunha de Miranda, R. Guillemin, I. Ismail, L. Journal, T. Marchenko, J. Palaudroux, F. Penent, M. N. Piancastelli, M. Simon, O. Travnikova F. Brauße, G. Goldsztejn, A. Rouzée, M. Geoleoc, R. Geneaux, T. Ruchon, J. Underwood, D. M. P. Holland, A. S. Mereshchenko, P. K. Olshin, P. Johnsson, S. Maclot, J. Lahl, A. Rudenko, F. Ziaee, M. Brouard, **D. Rolles**, *Coulomb-explosion imaging of concurrent CH<sub>2</sub>BrI photodissociation dynamics*, [Phys. Rev. A \*\*96\*\*, 043415 \(2017\)](#).

#### 2018:

51. F. Brauße, G. Goldsztejn, K. Amini, **R. Boll**, S. Bari, C. Bomme, M. Brouard, M. Burt, B. Cunha de Miranda, S. Düsterer, **B. Erk**, M. Geoleoc, R. Geneaux, A. S. Gentleman, R. Guillemin, I. Ismail, P. Johnsson, L. Journal, T. Kierspel, H. Köckert, J. Küpper, P. Lablanquie, J. Lahl, J.W.L. Lee, S. R. Mackenzie, S. Maclot, B. Manschwetus, A. S. Mereshchenko, T. Mullins, P. K. Olshin, J. Palaudroux, S. Pattchkovskii, F. Penent, M. N. Piancastelli, **D. Rompotis**, T. Ruchon, A. Rudenko, **E. Savelyev**, N. Schirmel, S. Techert, O. Travnikova S. Trippel, J. G. Underwood, C. Vallance, J. Wiese, M. Simon, D. M. P. Holland, T. Marchenko, A. Rouzée, **D. Rolles**, *Time-resolved inner-shell photoelectron spectroscopy: from a bound molecule to an isolated atom*, Phys. Rev. A, in press (2018).
52. T. Osipov, C. Bostedt, J.-C. Castagna, K. Ferguson, M. Bucher, S. Montero, M. Swiggers, R. Obaid, **D. Rolles**, A. Rudenko, J. Bozek, N Berrah, *The LAMP Instrument at the Linac Coherent Light Source Free-Electron Laser*, [Rev. Sci. Instr. \*\*89\*\*, 035112 \(2018\)](#).
53. **D. Rolles**, **R. Boll**, **B. Erk**, **D. Rompotis**, B. Manschwetus, *An Experimental Protocol for Femtosecond NIR/UV-XUV Pump-Probe Experiments with Free-Electron Lasers*, [Journal of Visualized Experiments](#), in press (2018).
54. L. Young, K. Ueda, M. Guehr, P.H. Bucksbaum, M. Simon, S. Mukamel, N. Rohringer, K.C. Prince, C. Masciovecchio, M. Meyer, A. Rudenko and **D. Rolles**, C. Bostedt, M. Fuchs, D.A. Reis, R. Santra, H. Kapteyn, M. Murnane, H. Ibrahim, F. Légaré, M. Vrakking, M. Isinger, D. Kroon, M. Gisselbrecht, A. L'Huillier, H.J. Woerner, S.R. Leone, *Roadmap of Ultrafast X-ray Atomic and Molecular Physics*, [J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. \*\*51\*\*, 032003 \(2018\)](#).
55. K. Amini, **E. Savelyev**, F. Brauße, N. Berrah, **C. Bomme**, M. Brouard, M. Burt, L. Christensen, S. Düsterer, **B. Erk**, H. Höppner, T. Kierspel, F. Krecinic, A. Lauer, J.W.L. Lee, M. Müller, E. Müller, T. Mullins, H. Redlin, N. Schirmel, S. Techert, J. Thørgersen, S. Toleikis, R. Treusch, S. Trippel, A. Ulmer, C. Vallance, J. Wiese, P. Johnsson, J. Küpper, A. Rudenko, A. Rouzée, H. Stapelfeldt, **D. Rolles**, R. Boll, *Photodissociation of Aligned CH<sub>3</sub>I and C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>F<sub>2</sub>I Molecules probed with Time-Resolved Coulomb Explosion Imaging by Site-Selective Extreme Ultraviolet Ionization*, [Struct. Dyn. \*\*5\*\*, 014301 \(2018\)](#).
56. M. Fisher-Levine, **R. Boll**, F. Ziaee, C. Bomme, **B. Erk**, **D. Rompotis**, T. Marchenko, A. Nomerotski, **D. Rolles**, *Time-resolved ion imaging at free-electron lasers using TimepixCam*, [J. Synchr. Rad. \*\*25\*\*, 336-345 \(2018\)](#).

#### *Eingereichte Veröffentlichungen, die auf Arbeit der Nachwuchsgruppe basieren:*

1. T. Kierspel, **C. Bomme**, M. Di Fraia, J. Wiese, **D. Anielski**, S. Bari, **R. Boll**, **B. Erk**, J. S. Kienitz, N. L. M. Müller, **D. Rolles**, J. Viehhaus, S. Trippel, J. Küpper, *Photophysics of indole upon x-ray absorption*, submitted to Phys. Chem. Chem. Phys. (2018).
2. **B. Erk**, J.P. Müller, **C. Bomme**, **R. Boll**, G. Brenner, H. Chapman, J. Correa, S. Düsterer, S. Dziarzhyski, S. Eisebitt, H. Graafsma, S. Grunewald, L. Gumprecht, R. Hartmann, G. Hauser, B. Keitel, C. Von Korff Schmising, M. Kuhlmann, B. Manschwetus, L. Mercadier, R. Müller, C. Passow, E. Plönes, D. Ramm, **D. Rompotis**, A. Rudenko, D. Rupp, M. Sauppe, F. Siewert, D. Schlosser, L. Strüder, A. Swiderski, S. Techert, K. Tiedtke, T. Tilp, R. Treusch, I. Schlichting, J. Ullrich, R. Moshhammer, T. Möller, **D. Rolles**, *CAMP@FLASH - An End-Station for Imaging, Electron- and Ion-Spectroscopy, and Pump-Probe Experiments at the FLASH Free-Electron Laser*, submitted to J. Synchr. Rad. (2018).

3. M. Sauppe, D. **Rompotis**, **B. Erk**, S. Bari, T Bischoff, **R. Boll**, **C. Bomme**, C. Bostedt, S. Dörner, S. Düsterer, T. Feigl, L. Flückiger, T. Gorkhover, K. Kolatzki, B. Langbehn, N. Monserud, E. Müller, J.P. Müller, C. Passow, D. Ramm, **D. Rolles**, K. Schubert, L. Schwob, B. Senffleben, R. Treusch, A. Ulmer, H. Weigelt, J. Zimbalski, J. Zimmermann, T. Möller, D. Rupp, *XUV double-pulses with femtosecond to 650 picoseconds separation from a multilayer mirror based split-and-delay unit at FLASH*, submitted to J. Synchr. Rad. (2018).
4. B. Rudek, K. Toyota, L. Foucar, **B. Erk**, R. Boll, **C. Bomme**, J. Correa, S. Carron, S. Boutet, G.J. Williams, K.R. Ferguson, R. Alonso-Mori, J.E. Koglin, T. Gorkhover, M. Bucher, C.S. Lehmann, B. Kraessig, S.H. Southworth, L. Young, C. Bostedt, K. Ueda, T. Marchenko, M. Simon, Z. Jurek, R. Santra, A. Rudenko, S.-K. Son, and **D. Rolles**, *Relativistic and resonant effects in the ionization of heavy atoms by ultra-intense hard X-rays*, submitted to Nature Physics (2018).
5. R. Forbes, A. De Fanis, **C. Bomme**, **D. Rolles**, S.T. Pratt, I. Powis, N.A. Besley, T. Marchenko, M. Simon, S. Nandi, C. Nicolas, J.D. Bozek, J. G. Underwood, D. Holland, *Photoionization of the iodine 3d, 4s, and 4p orbitals in methyl iodide*, submitted (2018).