

Sachbericht für 2006

Virtuelles Institut

'Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from Free Electron Lasers' Kennziffer VH-Vi-103

A1) Fortschritt des im Antrag beschriebenen Arbeitsprogramms:

Im Jahr 2006 wurde zwischen den beteiligten Arbeitsgruppen im Virtuellen Institut (VI) 'Atomic and Cluster Physics with Short Wavelength Radiation from Free Electron' sehr intensiv zusammen gearbeitet. In einem Arbeitsgespräch des Virtuellen Instituts trafen sich die beteiligten Arbeitsgruppen (AG Dörner (Univ. Frankfurt), AG Meiwes-Broer (Univ. Rostock), AG Möller (TU-Berlin) sowie als Gastgeber und federführendes Mitglied HASYLAB (DESY) vertreten durch Frau Elke Plönjes und Frau Kuhlmann am 26. Januar 2006. Dort berichteten die Arbeitsgruppen über die erzielten Fortschritte. Es wurden Konzepte für eine Mikrofokussierung basierend auf Multilayerspiegeln diskutiert.

TU Berlin

Im Februar 2006 begann die Arbeitsgruppe an der TU-Berlin mit ersten Experimenten an Clustern am FLASH-FEL bei DESY. Diese Arbeiten haben das Ziel ein detailliertes Verständnis der Wechselwirkung hochintensiver Röntgenpulse mit Nanopartikeln zu liefern. Neben Flugzeitmassenspektroskopie zur Bestimmung der kinetischen Energie und der Ladungszustände von Fragmenten kam auch die Elektronenspektroskopie zum Einsatz. Es zeigt sich, dass die Cluster bei der Ionisation kontinuierlich aufgeladen werden. Die Ergebnisse werden derzeit ausgewertet und eine gemeinsame Publikation mit der Arbeitsgruppe an der Universität Rostock befindet sich in der Vorbereitung. Von Rostocker Seite wurden detaillierte Rechnungen zur Ionisation durchgeführt. In der Messzeit gelang es außerdem die Streuung von weicher Röntgenstrahlung an Clustern nachzuweisen und ihre Winkelabhängigkeit als Funktion der Teilchengröße aufzunehmen. Hier ist herauszuheben, dass es erstmals gelang mit fs-Pulsen Streubilder an Nanopartikeln in der Gasphase zu detektieren. Dies ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu Strukturbestimmung einzelner Teilchen und Makromoleküle.

Die Berliner Gruppe hat im Frühjahr 2006 bei HASYLAB eine erste Messzeit mit einem COLTRIMS-Detektor durchgeführt, wobei die Hilfe der Frankfurter Gruppe (AG Dörner) unerlässlich war. Insbesondere entwickelte Herr L. Foucar aus Frankfurt wesentliche Teile der Software, die zur Datennahme mit dem COLTRIMS-Detektor notwendig war. In dieser und einer nachfolgenden Messzeit im Herbst konnten Ionenspektren von Clustern aufgenommen werden. Die Daten werden z. Z. ausgewertet und für die Publikation vorbereitet. Sehr intensiv wurden auch die Experimente an größenselektierten Metallclustern fortgeführt. Im November 2006 gelang es die Photoelektronenspektren von Bleiclusterionen im Größenbereich 4 bis 65 Atomen pro Cluster aufzunehmen. Diese Untersuchungen wurden im Rahmen der Kooperation von der Universität Frankfurt, Universität Rostock, der Universität Konstanz, sowie DESY und BESSY durchgeführt. Hier war es erstmals möglich Innerschalenspektren von größenselektierten Clustern aufzunehmen. Die experimentellen Daten deuten darauf hin, dass bei einer Clustergröße von etwas 20 Atomen ein Wechsel von metallischem zum kovalentem Bindungstyp auftritt.

Impuls- und Vernetzungsfonds

Auch zwischen der AG in Berlin und der AG Dörner kam es zu einer sehr intensiven Zusammenarbeit, in dem die Gruppen einen gemeinsamen Messzeitantrag für Experimente mit dem COLTRIMS-Detektor für den FLASH-FEL bei DESY eingereicht haben. Im November gelang es erste Experimente mit einer Mikrofokusoptyk am FLASH FEL durchzuführen. Der Spiegel arbeitet bei senkrechtem Einfall und erlaubt es eine Leistungsdichte im Bereich von mehr als 10^{15} W/cm² bei einer Fokusgröße von etwa 5 µm zu erzielen. Unter diesen Bedingungen konnte in atomarem Xenongas Ionen bis zu Xe¹⁴⁺ nachgewiesen werden. Darüber hinaus gelang es in dotierten Clustern den Energietransfer von Atomen im Inneren auf die Clusterhülle zu untersuchen. Diese Experimente sind im Hinblick auf die Abbildung von Biomolekülen von Interesse. Hier besteht die Hoffnung, dass sich die Coulombexplosion und damit die Strahlenschädigung verringern lässt, indem man Moleküle mit einer Schutzhülle versieht, die dafür sorgt, dass das Molekül im Inneren neutral bleibt. Für 2007 ist geplant die intensive Zusammenarbeit zwischen den Arbeitsgruppen, insbesondere auf dem Gebiet zeitaufgelöster Experimente fortzusetzen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Partner des virtuellen Institutes sehr erfolgreich zusammenarbeiten und die Synergien, die sich aus den unterschiedlichen Kompetenzen ergeben, sehr effektiv nutzen.

Universität Rostock

Im Herbst 2006 konnten am FLASH, DESY Hamburg, Experimente mit VUV-Laserstrahlung an Metallclustern und Fullerenen durchgeführt werden. Zu diesem Zweck ist zur ersten Strahlzeit zwischen dem 24. und 30.09.2006 ein zuvor in Rostock fertiggestelltes Flugzeit-Massenspektrometer im 100µm-Fokus des FEL-Strahls aufgebaut worden. Die Kombination dieses Aufbaus mit dem dahinter positionierten Experiment zur Photoelektronenspektroskopie an massenselektierten Clusteranionen an einer Beamline ermöglichte eine optimale Nutzung der Messzeit. Mithilfe eines Ofens wurde ein Molekularstrahl aus Fullerenen und kleinen Antimonclustern erzeugt und die Ionisation im FEL-Licht untersucht. Dabei konnte die Aufladung von C₆₀- und C₇₀-Molekülen bei hohen Intensitäten im VUV-FEL-Licht untersucht werden, die aus der resonanten Anregung des Volumenplasmons mit den 38 eV FEL-Pulsen stammen. Neben der Häufigkeit der geladenen Fullerenfragmente lassen sich aus den gewonnenen Spektren Rückschlüsse auf die Aufladungsdynamik ziehen. Die Ergebnisse werden gerade in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von C. Bordas vom Laboratoire de Spectrométrie Ionique et Moléculaire an der Universität Lyon analysiert.

Für eine weitere Messzeit am 03./04.12.2006 wurde an die bereits in Hamburg aufgebaute Spektrometerkammer die aus Rostock stammende Magnetron-Sputterquelle für 3-4 nm große Metallcluster angeschlossen. Ein Quadrupol-Analysator zur in-situ Bestimmung der Clustergrößen sowie diverse Kammern mit Pumpstufen und Blenden vervollständigten das erste Experiment zur Ionisation von Metall-Nanopartikeln im FEL-Licht. Dabei konnte neben dem Nachweis unterschiedlicher Pb-Fragmente auch die Rückstoßenergie für Pb⁺ und Pb⁺⁺ zu 6 eV bzw. 40 eV abgeschätzt werden. Für die nahe Zukunft sind auch Experimente bei höheren Pulsintensitäten im 10µm-Fokus und kleineren Wellenlängen von 13 nm in der Zusammenarbeit mit der Gruppe Möller geplant.

Wir möchten anmerken, dass wir durch den Einsatz eigener Ressourcen das Vorhaben in der ersten Phase finanziell schonen konnten. Dieses hat sich inzwischen geändert. Insbesondere durch die am FLASH gemachten Erfahrungen und den sich daraus ergebenden Modifikationen im Projektablauf werden alle in Aussicht gestellten Mittel benötigt. Insgesamt werden sich damit die gesteckten Ziele erreichen lassen.

Universität Frankfurt

In 2006 wurde die Detektorentwicklung zum Multihitnachweis von Elektronen und Ionen für die geplanten Experimente am FEL weitergeführt. Die Datenaufnahme mit dem Aquiris System war einsatzbereit. In Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Dr. Joachim Ullrich wurde im Jan/Feb 2006 eine Strahlzeit am FLASH durchgeführt. Dabei hat sich die Datenaufnahme als absolut essentiell für den Erfolg solcher Messungen herausgestellt. Es konnten erfolgreich Daten zur Multiphotonenionisation von Neon aufgenommen werden. Dies sind die ersten differentiellen Daten zu diesem Prozess überhaupt. Die Experimente litten trotz einem Grundvakuum von 10-11 mbar Bereich noch unter einem erheblichen Untergrund von Elektronen aus dem Restgas. Die Inonenimpulsmessung war jedoch sehr erfolgreich. Eine erste Veröffentlichung aus dieser Messkampagne ist gerade bei Physical Review Letters erschienen:

Few-photon multiple ionization of Ne and Ar by strong FLASH pulses

R. Moshhammer, Y. H. Jiang, L. Foucar, A. Rudenko, Th. Ergler, C. D. Schröter, S. Lüdemann, K. Zrost, D. Fischer, J. Tietze, T. Jahnke, M. Schöffler, T. Weber, R. Dörner, T. Zouros, A. Dorn, T. Ferger, K. U. Kühnel, R. Treusch, P. Radcliff, E. Plönjes, and J. Ullrich
Phys. Rev. Lett. **98**, 203001 (2007)

Darüber hinaus konnten auch erfolgreich Daten zur Ionisation von Wasserstoff genommen werden. Die Aquiris Datenaufnahme erlaubt es auch Schuss für Schuss die FLASH Intensität mitzuschreiben und die Daten entsprechend zu analysieren. Für eine weitere Strahlzeit im Februar 2007 wurden insbesondere das Vakuum der Streukammer entscheidend verbessert.

Die von der Frankfurter Seite entwickelte Datenaufnahme wurde in verschiedenen Messkampagnen der Mitglieder des Virtuellen Instituts inzwischen mit großem Erfolg eingesetzt.

DESY

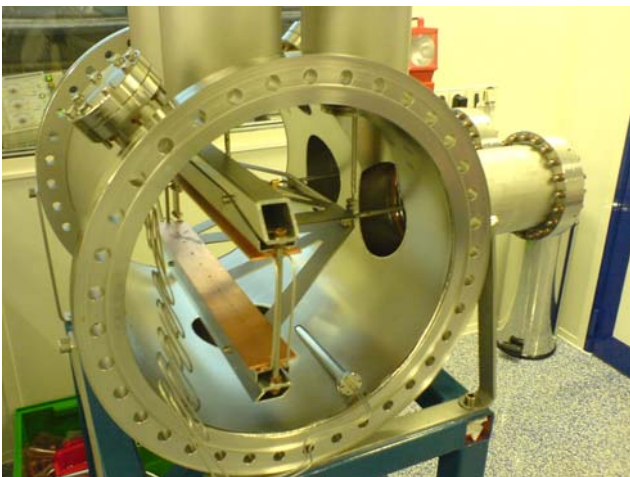
Auch im dritten Projektjahr des virtuellen Instituts hat HASYLAB sich aktiv an der Durchführung der Nutzerexperimente der AGs Möller, Meiwes-Broer und Dörner während der Strahlzeiten am VUV-FEL beteiligt. Großes wissenschaftliches Interesse in der Clusterphysik besteht in der Erforschung der nichtlinearen Wechselwirkung intensiver kurzwelliger Lichtpulse mit Materie sowie der Streuung von Licht an Nanoteilchen. Beide wissenschaftlichen Initiativen erfordern eine möglichst große Konzentration der hoch intensiven Lichtpulse von FLASH. Um diese Experimente zu ermöglichen stellt FLASH einen Mikrofokus-Messplatz zu Verfügung, dessen elliptische Optik eine Fokussierung auf $< 16\mu\text{m}$ Durchmesser bei einer Fokallänge von 2m erreicht. Eine noch stärkere Fokussierung kann allerdings nur bei Verkürzung der Fokallänge erreicht werden, was apparativ einen Einbau der Fokussieroptik in die experimentelle Kammer bedeutet. Erste Tests einer Spiegeloptik bestehend aus vier Spiegeln unter streifendem Strahleinfall im Jahr 2005 in Zusammenarbeit mit der Gruppe P. Zeitoun, LOA, Frankreich haben gezeigt, dass Spiegeloptiken dieser Art sehr schwierig unter den Bedingungen des VUV-FEL zu handhaben sind. Alternativ wurde das Konzept eines zuvor unter der Teilnahme von DESY durchgeführten proof-of-principle Experimentes, bei dem ein EUV (extreme ultraviolet) Multilayer-Spiegel verwendet wurde, für die Clusterapparatur adaptiert. Hierbei wurde ein sphärischer EUV-Vielschichtspiegel in senkrechter Geometrie für die Fokussierung auf ca. $3\mu\text{m}$ Durchmesser benutzt.

Für das Clusterexperiment wurde, neben dem apparativen Vorschlag, bei DESY zusätzlich der Spiegelhalter konstruiert und gefertigt. Bei einer Fokallänge von 30cm konnte somit ein

Impuls- und Vernetzungsfonds

Fokus von ca. 5µm Durchmesser erreicht werden. Da der Durchmesser quadratisch in die Leistungsdichte eingeht, bedeutet dies eine 10mal höhere Lichtkonzentration als zuvor möglich. Hinzu kommt, dass diese optische Anordnung ein Tandem-Experiment - das heißt der bereits in einer vorderen Experimentierkammer benutzte FLASH-Lichtstrahl kann durch die Refokussierung mithilfe des sphärischen Spiegels ein weiteres Mal in einer zweiten Experimentierkammer benutzt werden - ermöglicht und damit eine besonders effiziente Nutzung der Messzeit erlaubt.

Eine Schwierigkeit für alle Nutzergruppen des FEL stellt die dem SASE (self amplified spontaneous emission) inhärente Variabilität der Strahleigenschaften, zum Beispiel der Intensität des FEL, die in einem Gasdetektor online für jeden Schuss gemessen wird, oder die Änderung des Spektrums des FEL von Schuss zu Schuss dar. Zur Messung des Spektrums des FEL während der Nutzerexperimente wurde ein Online-Spektrometer entwickelt. Das Spektrometer lenkt die FEL-Strahlung an Stelle eines der Beamline-Spiegel in der 0. Ordnung zu den Experimentierstationen während gleichzeitig in der 1. Ordnung das Spektrum bestimmt wird. Um den gesamten Wellenlängenbereich, welcher von den Experimenten benötigt wird, abzudecken, werden zwei Gitter mit unterschiedlicher und variabler Linienbreite benötigt. Das Design ermöglicht Auflösungen $\lambda/\Delta\lambda$ zwischen 500 und 3000. Im dritten Projektjahr wurden das Design und die technischen Zeichnungen für das Spektrometer gemeinsam mit BESSY erstellt und die Komponenten bei DESY gefertigt. Besonderer Wert wurde auf eine Konstruktion gelegt, die es ermöglicht, ein zwei Gitter, die damit den gesamten Wellenlängenbereich abdecken, und einen Spiegel, der, wenn nötig, alle Intensität zum Experiment leitet und mit zwei Beschichtungen, Kohlenstoff und Nickel, den gesamten Wellenlängenbereich auch der höheren Harmonischen abdeckt, einzubauen und zu justieren. Der Aufbau ist in Abbildung 1 zu sehen. Zurzeit wird das Gerät für den Einbau in der Beamline vorbereitet, so dass erste Tests und Kalibrierungen des Geräts im letzten Projektjahr durchgeführt werden können. Die partikelfreie Reinigung, die Voraussetzung für den Einbau eines Gerätes in das Beschleunigervakuum von FLASH ist, und der Zusammenbau erfolgen im Reinraum, siehe Abbildungen 2 und 3.



**Abb. 1: Spiegel- und Gitterhalterung
in der Vakuumkammer**

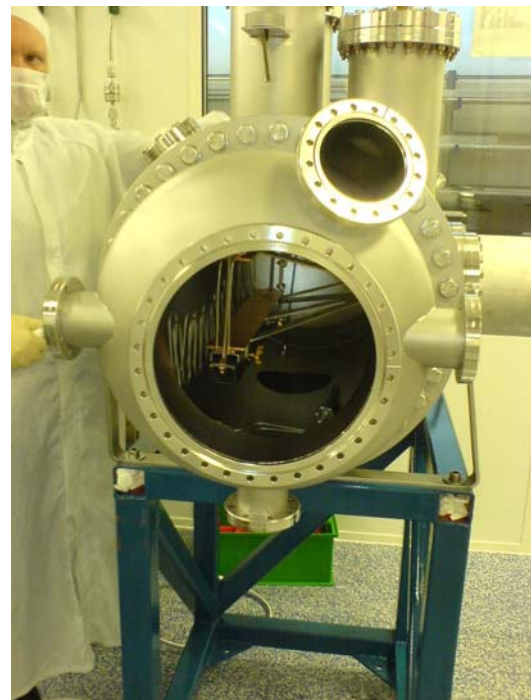


Abb. 2: Spiegelkammer in Strahlrichtung



Abbildung 3: Zusammenbau der Spiegelkammer im Reinraum ist abgeschlossen

A2) Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses:

Im Berichtszeitraum wurde der wissenschaftliche Nachwuchs sehr intensiv gefördert. Dies geschah auf *vier* Ebenen: Der Darstellung des Forschungsprogramms des VI für Studenten auf speziellen Kursen und Sommerschulen (z.B. Vorlesungen Summer School on Synchrotron Radiation, Triest, Mai, 2006), durch die Einbindung von Diplomanden, der Mitarbeit von Doktoranden, sowie der daran anschließenden Qualifikationsstufen wie Postdocs und wissenschaftliche Assistenten mit dem Ziel der Habilitation. In dem VI arbeiten neben den HGF-geförderten Doktoranden etwa 10 Diplomanden sowie 6 Doktoranden mit. Einer der in die Koordination eingebundenen Mitarbeiter bereitet sich auf die Habilitation vor.

Die Weiterbildung und Ausbildung des Nachwuchses geschieht auch in enger Kooperation durch regelmäßige Kolloquia mit dem SFB 567 'Stark korrelierte Vielteilchensysteme'. Auch auf diesem Wege wird der wissenschaftliche Nachwuchs weiter qualifiziert und an die hervorragenden Forschungsmöglichkeiten der HGF herangeführt. Im Berichtszeitraum wurde mit der Planung einer Konferenz begonnen, des Clustertreffens 2007 in Berlin (<http://www.physik.tu-berlin.de/institute/OI/clustertreffen2007/aktuell.htm>), das sich vorwiegend an Nachwuchswissenschaftler wendet und auf dem ein Schwerpunktthema die Cluster-FEL Wechselwirkung sein wird.

In Rostock sind über die direkt im Rahmen des VI geförderte Doktorandenstelle hinaus eine Reihe weiterer Doktoranden und Diplomanden bzw. Masterstudenten in die Vorbereitung und Durchführung der Experimente am Freie-Elektronen-Laser FLASH involviert. Eine Diplom- und eine Masterarbeit stehen kurz vor dem Abschluss. Aus Mitteln des VI konnte ein Doktorand die Tagung 'Atomic Physics 2006' am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in Dresden besuchen.

Darüber hinaus reicht die Problemstellung des VI in weitere zukünftige Arbeiten hinein. Thematisch besteht Verbindung zum Sonderforschungsbereich 652 'Starke Korrelationen und kollektive Phänomene im Strahlungsfeld', in dessen regelmäßigen Workshops die Doktoranden auch über die Arbeiten im Rahmendes VI berichten. In Bezug auf das experimentelle Know-how und die Entwicklung der Methoden hat sich die enge Kooperation mit dem BMBF-geförderten Verbundprojekt zur Photoelektronenspektroskopie an Metallclustern am FEL als erfolgreich erwiesen.

Nach den Messperioden am FLASH-FEL bei DESY an denen die Diplomanden und Doktoranden der beteiligten Arbeitsgruppen teilnehmen treffen sie sich zu Arbeitstreffen, auf den die Diplomanden und Doktoranden die erzielten Ergebnisse und die Auswertung vorstellen. Insgesamt hat sich ein lebendiger Austausch der Nachwuchswissenschaftler der Partnergruppen entwickelt, der sehr maßgeblich den Erfolg der FEL-Experimente im Berichtszeitraum ermöglicht hat.

B) Erreichte Meilensteine:

Aufbau und Test des Coltrimsdetektors; Aufnahme von Streubildern großer Nanoteilchen; erste Messung der Innerschalen-Photoemissionspektren von Bleiclustern; Aufbau und Inbetriebnahme einer Mikrofokusoptik; erste Experimente mit der Mikrofokusoptik bei extrem hoher Leistungsdichte an Clustern; Photoelektronenspektroskopie an Fullerenen und Metallclustern mit einem Massenspektrometer; Multiphotonenionisation von Neon mit Aquiris System; Aufbau eines Onlie-Spektrometers

C) Einhaltung des Finanzierungs- und Zeitplans

Der Finanzierungs- und Zeitplan konnte grundsätzlich eingehalten werden.

D) Publikationen, Vorträge

Die sehr vielversprechenden Ergebnisse wurden bereits auf mehreren internationalen Workshops und Konferenzen (u.A. Symposium Many-Particle Dynamics and Precision Spectroscopy: Trends and Applications, Heidelberg; Atom 2006, Dresden) vorgestellt und werden zur Publikation vorbereitet.