

**Zwischenbericht (Sachbericht)**

<b>Förderinstrument:</b>	Helmholtz-Nachwuchsgruppen
<b>Impulsfonds-Förderkennzeichen:</b>	VH-NG-1105
<b>Projekttitle:</b>	Novel soft X-ray spectroscopies for materials science
<b>Nachwuchsgruppenleiter/in:</b>	Dr. Martin Beye
<b>Helmholtz-Zentrum:</b>	DESY
<b>Beteiligte Hochschule:</b>	Universität Hamburg
<b>Berichtszeitraum (=Kalenderjahr):</b>	1/2017-12/2017

**1) Struktur der Nachwuchsgruppe**

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

Wie im letzten Bericht beschrieben, hat es die Fokussierung zu Beginn auf den Aufbau der Messapparatur nötig gemacht, anstelle von Doktoranden, einen erfahrenen PostDoc einzustellen. Dieser ist seit dem 1.1.2017 Mitglied der Gruppe (neben dem Gruppenleiter) und trägt wesentlich zu dem Erfolg bei. Seit 12/2017 ist auch eine studentische Hilfskraft einen Tag wöchentlich in der Gruppe tätig (zuerst Datenauswertung, später Mithilfe bei der Inbetriebnahme der Messapparatur). Da der Aufbau der Kammer im Frühjahr 2018 mit der Inbetriebnahme enden soll, wird aktiv nach weiteren Gruppenmitgliedern (speziell Doktoranden) gesucht und einem Doktorandenkandidaten ist eine Einstellung in Aussicht gestellt worden. Weitere Kandidaten haben Interesse bekundet. Darüber hinaus war ein gemeinsamer Antrag auf eine weitere Stelle zusammen mit Dr. Bajt (DESY) erfolgreich. Ein PostDoc wurde 10/2017 eingestellt, hat aber gegen Ende des Jahres leider schon seine Kündigung eingereicht, um eine Stelle in der Industrie anzutreten.

**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).*

Die Nachwuchsgruppe gehört organisatorisch zur Einheit FS-FLASH. Zusammenarbeit mit den dortigen Kollegen ist sehr eng (auch durch gemeinsame Forschungsprojekte) und die Gruppe ist in regelmäßige Meetings eingebunden (wöchentliches Treffen DESY-FS, wöchentliches Meeting FS-FLASH-Mitarbeiter abwechselnd mit Festangestelltentreffen FS-FLASH). Im Rahmen eines Strategieprozesses bei DESY sind „Kompetenzteams“ eingerichtet worden, die auch nach Abschluss der Strategieplanung bestehen bleiben sollen. Die Gruppe arbeitet aktiv in zwei Teams mit (Weiterentwicklung von FLASH und Eigenforschung im Bereich „Nano- und neue Materialien“). Auch in die Projektplanung von FLASH2020 und für den Bau eines neuen Strahlrohrs bei FLASH ist die Gruppe eingebunden. Das nächste große Ausbauprojekt bei DESY ist die Erweiterung des Speicherrings PETRA III zu PETRA IV, wo die Gruppe an der Erstellung des wissenschaftlichen Konzepts führen mitarbeitet. Damit werden Beiträge geleistet, die ideale Rahmenbedingungen für die Forschung der Gruppe weiterhin garantieren sollen.

Die enge Zusammenarbeit mit Kollegen bei DESY findet auch Ausdruck in mehreren gemeinsamen Forschungsprojekten mit verschiedenen Wissenschaftlern bei DESY.

**3) Zufriedenheit**

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

Die Zusammenarbeit mit DESY funktioniert einwandfrei und die Unterstützung auf allen administrativen Ebenen ist hervorragend. Auch die Zusammenarbeit mit der Konstruktionsabteilung zum Aufbau der Messapparatur ist herausragend. In der

Zusammenarbeit mit der Universität haben sich noch wenig Anknüpfungspunkte ergeben und das Engagement beschränkt sich momentan auf gelegentliche Vorlesungsververtretung und das Angebot von Themen für ein Proseminar. Eine studentische Hilfskraft wird beschäftigt und kann hoffentlich für die Durchführung einer Master-Arbeit in der Gruppe gewonnen werden.

#### **4) Arbeitsfortschritt / Meilensteine**

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

Im Arbeitsprogramm essentiell ist zur Zeit der Aufbau der Messapparatur der mit der Inbetriebnahme im Frühjahr 2018 abgeschlossen werden soll. Praktisch alle wichtigen Teile sind bestellt und die Aufbauplanung ist abgeschlossen. Abweichend vom Arbeitsprogramm wurde ein erfahrener PostDoc eingestellt, um besser den Aufbau der Apparatur begleiten zu können. Dadurch ergaben sich Anpassungen für die Personalplanung in 2017.

#### **5) Finanz-/Zeitplan**

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

Bei einigen Teilen zum Aufbau der Messapparatur zeichnen sich leichte Kostenerhöhungen in Teilen ab, die für den Erfolg der Apparatur essentiell sind. Momentan ist allerdings noch keine genauere Bestimmung der Kosten möglich. Eine Erhöhung der Investitionskosten könnte aber leicht durch eine entsprechend geänderte Personalplanung aufgefangen werden.

#### **6) Status**

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

Es gibt momentan keine Berufung auf eine (Junior-) Professur. Als Voraussetzung dafür soll aber eine Habilitation angefertigt werden.

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

Der Gruppenleiter bietet zurzeit ein Thema in einem Proseminar an und hat schon einige Vorlesungen für andere Professoren vertreten.

#### **8) Publikationen der Gruppe**

Die Publikationen im Berichtszeitraum resultieren häufig noch aus Messdaten, die vor der Zeit als Gruppenleiter gewonnen worden. Daher ist die in den Publikationen angegebene Affiliation bzw. Finanzierung teilweise noch uneinheitlich:

1. A. R. Nilsson, J. LaRue, H. Öberg, H. Ogasawara, M. Dell'Angela, M. Beye, H. Öström, J. Gladh, J. K. Nørskov, W. Wurth, F. Abild-Pedersen, and L. G. M. Pettersson. "Catalysis in real time using X-ray lasers". *Chem Phys Lett* 675 (Feb. 2017), pp. 145-173.
2. S. Eckert, J. Norell, P. S. Miedema, M. Beye, M. Fondell, W. Quevedo, B. Kennedy, M. Hantschmann, A. Pietzsch, B. E. Van Kuiken, M. Ross, M. P. Minitti, S. P. Moeller, W. F. Schlotter, M. Khalil, M. Odelius, and A. Föhlisch. "Ultrafast Independent N-H and N-C Bond Deformation Investigated with Resonant Inelastic X-Ray Scattering". *Angew. Chem. Int. Ed.* 56.22 (May 2017), pp. 6088–6092.
3. Ph. Wernet, T. Leitner, I. Josefsson, T. Mazza, P. S. Miedema, H. Schröder, M. Beye, K. Kunnus, S. Schreck, P. Radcliffe, S. Düsterer, M. Meyer, M. Odelius, and A. Föhlisch. "Communication: Direct evidence for sequential dissociation of gas-phase Fe(CO)<sub>5</sub> via a singlet pathway upon excitation at 266 nm". *J. Chem. Phys.* 146.21 (June 2017), p. 211103.
4. J. LaRue, O. Krejčí, L. Yu, M. Beye, M. L. Ng, H. Öberg, H. Xin, G. Mercurio, S. Moeller, J. J. Turner, D. Nordlund, R. Coffee, M. P. Minitti, W. Wurth, L. G. M. Pettersson, H. Öström, A. Nilsson, F. Abild-Pedersen, and H. Ogasawara. "Real-Time Elucidation of Catalytic Pathways in CO Hydrogenation on Ru". *J Phys Chem Lett* 8 (Aug. 2017), pp. 3820–3825.
5. F. Marschall, Z. Yin, J. Rehanek, M. Beye, F. Döring, K. Kubicek, D. Raiser, S. T. Veedu, J. Buck, A. Rothkirch, B. Rösner, V. A Guzenko, J. Viehhaus, C. David, and S.

<p>Techert. "Transmission zone plates as analyzers for efficient parallel 2D RIXS-mapping". Sci. Rep. 7.1 (Aug. 2017), p. 8849.</p> <p>6. P. S. Miedema, R. Mitzner, S. Ganschow, A. Föhlisch, and M. Beye. "X-ray spectroscopy on the active ion in laser crystals". Phys. Chem. Chem. Phys. 19.32 (Aug. 2017), pp. 21800–21806.</p>
<p><b>9) Drittmittel</b></p>
<p>Im Rahmen des Exzellenzclusters CUI (Hamburg Center for Ultrafast Imaging) an der Uni Hamburg wurde ein Antrag für eine PostDoc / Doktoranden-Stelle gemeinsam mit Dr. Bajt (DESY Gruppenleiterin) für drei Jahre genehmigt.</p>
<p><b>10) Patentanmeldungen</b>  <i>Anzahl angemeldeter/erteilter Patente</i></p>
<p>Keine.</p>
<p><b>11) Preise / Auszeichnungen an Gruppenmitglieder / Rufe an Gruppenleiter/in</b></p>
<p>Keine.</p>