

Zwischenbericht (Sachbericht)

Förderinstrument:	Helmholtz-Nachwuchsgruppen
Impulsfonds-Förderkennzeichen:	VH-NG-1105
Projekttitle:	Novel soft X-ray spectroscopies for materials science
Nachwuchsgruppenleiter/in:	Dr. Martin Beye
Helmholtz-Zentrum:	DESY
Beteiligte Hochschule:	Universität Hamburg
Berichtszeitraum (=Kalenderjahr):	01/2018-12/2018

1) Struktur der Nachwuchsgruppe

Berichten Sie kurz über Aufbau und personelle Entwicklung Ihrer Gruppe.

Im Jahr 2018 bestand die Gruppe weiterhin aus dem PostDoc, dem auch eine Verlängerung seines Vertrages über das Jahresende hinaus in Aussicht gestellt wurde, um angefangene Projekte abzuschließen. Die studentische Hilfskraft war das ganze Jahr über in der Gruppe weiter regelmäßig beschäftigt und hat aktiv an Experimenten mitgeholfen. Zum Ende des Jahres hat er mit seiner Projektstudie zur Vorbereitung der Masterarbeit in der Gruppe begonnen und auch Interesse an einer zukünftigen Doktorandenstelle bekundet. Ein Doktorand hat 7/2018 begonnen, nachdem er schon an Messzeiten teilgenommen hatte. Weitere Einstellungen im Rahmen der Gruppe sind nicht geplant und nicht im Budget abgedeckt.

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 ist sehr gut in die Forschung bei FLASH und an anderen Großgeräten eingebunden, sichtbar in diversen gemeinsamen Projekten mit Wissenschaftlern bei FLASH und auch mit anderen DESY-Wissenschaftlern. Die Gruppe ist in die regelmäßigen Meetings bei FLASH eingebunden. Die Gruppe hat eine Hälfte zu dem wissenschaftlichen Teil des Reports zum Design-Konzept von FLASH2020+ beigetragen und leistet große Beiträge zu dem analogen Bericht für PETRA IV, um auch in Zukunft ideale Rahmenbedingungen für die Gruppe zu gewährleisten. Das wöchentliche, wissenschaftliche Gruppenseminar ist offen für Kollegen von PETRA und FLASH und wird auch regelmäßig gut besucht. Dieses Gruppenseminar findet sich auch im Vorlesungsverzeichnis der Universität Hamburg wieder und wird von Studenten gut besucht.

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 den Kollegen bei DESY ist hervorragend und die Unterstützung auf allen Ebenen ist ausgezeichnet (im speziellen in Anspruch genommen im technischen und administrativen Bereich).

4) Arbeitsfortschritt / Meilensteine

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

Als wichtigster Meilenstein in 2018 ist die erfolgreiche Inbetriebnahme der Messapparatur anzumerken. Bis auf das geplante Hochpräzisions-Gitter, dessen Lieferung für das Frühjahr 2019 vorgesehen ist (die Lieferzeit beträgt über zwei Jahre), ist das Instrument vollständig einsatzbereit und wurde schon häufig benutzt. Einige Upgrades der Hardware werden noch

durchgeführt um die Flexibilität zu erhöhen, aber Experimente mit der Apparatur wurden schon erfolgreich durchgeführt. Die einzigen Abweichungen von der Personal-Planung ergeben sich durch die Beschäftigung des PostDocs.

5) Finanz-/Zeitplan

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

Durch die geänderte Personalausstattung der Gruppe ergeben sich leicht erhöhte Investitionsmittel, die schon für Upgrades der Messapparatur eingesetzt werden. Anpassungen im experimentellen Teil sind auch abhängig von zukünftigen Erfolgen beim Beantragen von Messzeit und sind daher schwer planbar, wobei in der Vergangenheit immer genügend Messzeiten eingeworben werden konnten.

6) Status

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

Momentan gibt es keine Berufung auf eine Professur. Ende 2019 soll aber mit der Anfertigung einer Habilitation begonnen werden.

7) Lehrveranstaltungen der/s Nachwuchsgruppenleiters/in

Der Gruppenleiter trägt ein Thema zu einem Proseminar bei und veranstaltet das wöchentliche Seminar: „Röntgenspektroskopie mit FELs und Synchrotrons für katalytische und funktionale Materialien“ an der Universität Hamburg.

8) Publikationen der Gruppe

Die Gruppe hat 2018 folgende Publikationen erarbeitet (teilweise noch aus Messdaten vor Antritt der Gruppe, daher mit uneinheitlicher Affiliation):

- [1] E. Principi, E. Giangrisostomi, R. Mincigrucci, M. Beye, G. Kurdi, R. Cucini, A. Gessini, F. Bencivenga, and C. Masciovecchio, “Extreme ultraviolet probing of nonequilibrium dynamics in high energy density germanium”, *Phys. Rev. B* **97**, 174107 (2018).
- [2] P. S. Miedema and M. Beye, „Total 3s Emission Yield as Bulk-Sensitive Probe for a True Soft X-ray Absorption Spectrum?“, *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 2579 (2018).
- [3] R. M. Jay, J. Norell, S. Eckert, M. Hantschmann, M. Beye, B. Kennedy, W. Quevedo, W. F. Schlotter, G. L. Dakovski, M. P. Minitti, M. C. Hoffmann, A. Mitra, S. P. Moeller, D. Nordlund, W. Zhang, H. W. Liang, K. Kunnus, K. Kubicek, S. A. Techert, M. Lundberg, P. Wernet, K. Gaffney, M. Odelius, and A. Föhlisch, „Disentangling Transient Charge Density and Metal–Ligand Covalency in Photoexcited Ferricyanide with Femtosecond Resonant Inelastic Soft X-ray Scattering“, *J. Phys. Chem. Lett.* **9**, 3538 (2018).
- [4] T. Leitner, I. Josefsson, T. Mazza, P. S. Miedema, H. Schröder, M. Beye, K. Kunnus, S. Schreck, S. Düsterer, A. Föhlisch, M. Meyer, M. Odelius, and P. Wernet, „Time-resolved electron spectroscopy for chemical analysis of photodissociation: Photoelectron spectra of $\text{Fe}(\text{CO})_5$, $\text{Fe}(\text{CO})_4$, and $\text{Fe}(\text{CO})_3$ “, *J. Chem. Phys.* **149**, 044307 (2018).
- [5] C. David, B. Rösner, F. Döring, V. Guzenko, F. Koch, M. Lebugle, F. Marschall, G. Seniutinas, J. Raabe, B. Watts, D. Grolimund, Z. Yin, M. Beye, S. Techert, J. Viehhaus, G. Falkenberg, and C. Schroer, „Diffractive X-ray Optics for Synchrotrons and Free-Electron Lasers“, *Microsc Microanal* **24**, 268 (2018).
- [6] F. Döring, F. Marschall, Z. Yin, B. Rosner, M. Beye, P. Miedema, K. Kubicek, L. Glaser, D. Raiser, J. Soltau, V. A. Guzenko, J. Viehhaus, J. Buck, M. Risch, S. Techert, and C. David, „ID-Full Field Microscopy of Elastic and Inelastic Scattering with Transmission off-axis Fresnel Zone Plates“, *Microsc Microanal* **24**, 184 (2018).
- [7] N. Pontius, M. Beye, C. Trabant, R. Mitzner, F. Sorgenfrei, T. Kachel, M. Wöstmann, S. Roling, H. Zacharias, R. Ivanov, R. Treusch, M. Buchholz, P. Metcalf, C. Schüßler-Langeheine, and A. Föhlisch, „Probing the non-equilibrium transient state in magnetite by a jitter-free two-color X-ray pump and X-ray probe experiment“, *Struct. Dyn.* **5**, 054501 (2018).
- [8] Z. Yin, H. Löchel, J. Rehanek, C. Goy, A. Kalinin, A. Schottelius, F. Trinter, P. Miedema, A. Jain, J. Valerio, P. Busse, F. Lehmkuhler, J. Möller, G. Grübel, A. Madsen, J. Viehhaus, R. E. Grisenti, M. Beye, A. Erko, and S. Techert, „X-ray spectroscopy with variable line

spacing based on reflection zone plate optics“, <i>Optics Letters</i> 43 , 4390 (2018).
[9] Z. Chen, D. J. Higley, M. Beye, M. Hantschmann, V. Mehta, O. Hellwig, A. Mitra, S. Bonetti, M. Bucher, S. Carron, T. Chase, E. Jal, R. Kukreja, T. Liu, A. H. Reid, G. L. Dakovski, A. Föhlisch, W. F. Schlotter, H. A. Dürr, and J. Stöhr, “Ultrafast Self-Induced X-Ray Transparency and Loss of Magnetic Diffraction“, <i>Phys. Rev. Lett.</i> 121 , 137403 (2018).
[10] M. Beye, R. Y. Engel, J. O. Schunck, S. Dziarzhytski, G. Brenner, and P. S. Miedema, „Non-linear soft x-ray methods on solids with MUSIX—the multi-dimensional spectroscopy and inelastic x-ray scattering endstation“, <i>J. Phys.: Condens. Matter</i> 31 , 014003 (2018).
[11] S. Schreck, E. Diesen, J. LaRue, H. Ogasawara, K. Marks, D. Nordlund, M. Weston, M. Beye, F. Cavalca, F. Perakis, J. Sellberg, A. Eilert, K. H. Kim, G. Coslovich, R. Coffee, J. Krzywinski, A. Reid, S. Moeller, A. Lutman, H. Öström, L. G. M. Pettersson, and A. R. Nilsson, „Atom-specific activation in CO oxidation“, <i>J. Chem. Phys.</i> 149 , 234707 (2018).
9) Drittmittel
Im Rahmen der Verbundforschung wurde ein gemeinsamer Antrag mit einer Gruppe der Universität Hamburg für ein Instrument und zwei Wissenschaftler eingereicht.
10) Patentanmeldungen <i>Anzahl angemeldeter/erteilter Patente</i>
Ein für den Bau der Messapparatur entworfener Präzisions-Positionierahmen wurde von der Konstruktionsabteilung des DESY zum Patent angemeldet.
11) Preise / Auszeichnungen an Gruppenmitglieder / Rufe an Gruppenleiter/in
Der Gruppenleiter wurde vom „Journal of Physics: Condensed Matter“ als „Emerging Leader 2018“ ausgezeichnet und eingeladen, den oben unter Nr. 10 geführten Artikel einzureichen.