

JAHRESBERICHT 2021

Institut für Nanophotonik Göttingen e.V.

The image shows a close-up of a metallic sign for the IFNANO institute. The sign features the logo 'IFNANO' in large, bold letters, with 'IF' in black and 'NANO' in blue. Below the logo, the text 'INSTITUT FÜR NANOPHOTONIK' is visible in a smaller, black font. The sign is mounted on a metal pole. In the background, a modern building with large glass windows and a blue sky are visible, along with some greenery.

IFNANO
INSTITUT FÜR NANOPHOTONIK

Institut für Nanophotonik Göttingen e.V.

Hans-Adolf-Krebs-Weg 1
37077 Göttingen

Tel.: +49 (0)551/5035-0
Fax: +49 (0)551/5035-99

E-Mail: info@ifnano.de

www.ifnano.de

Impressum

Herausgeber

Institut für Nanophotonik Göttingen e.V. (IFNANO)

Redaktion: apl. Prof. Dr. Alexander Egner (verantwortlich)

Verfasser: Institutsdirektor apl. Prof. Dr. Alexander Egner, Tatjana Kasten, Verwaltung,
zuständige Abteilungen

Koordination, Gestaltung und Layout: Tatjana Kasten

Bei Abdruck ist die Einwilligung der Redaktion erforderlich.

Inhaltsverzeichnis

Contents

Vorwort	4	Preface.....	4
Leitbild	8	Mission Statement.....	8
Institutsstruktur.....	10	Institute Structure	10
Das Institut in Zahlen	12	Statistics of the Institute	12
Die Abteilungen	15	The Departments	15
Optische Nanoskopie	16	Optical Nanoscopy	16
Kurze Pulse / Nanostrukturen.....	32	Short Pulses / Nanostructures	32
Optik / Kurze Wellenlängen.....	52	Optics / Short Wavelengths	52
Photonische Sensorik.....	66	Photonic Sensor Technologies	66
Projekte.....	88	Projects.....	88
Publikationen.....	91	Publications.....	91
Konferenzbeiträge.....	94	Conference Contributions	94
Abschlussarbeiten	96	Final Thesis	96
Ausgewählte Kooperationspartner	97	Selected Cooperation Partners.....	97
ZUSE-Gemeinschaft	98	ZUSE-Gemeinschaft	98

Vorwort

Preface

Liebe Leserinnen und Leser,

Schnelltests sind seit Beginn der Corona-Pandemie allgegenwärtig. Sie spielen jedoch schon seit langem eine wichtige Rolle – nicht nur in der Human-, sondern auch in der Tiermedizin, der Forensik oder der Umwelt- und Gefahrstoffanalytik. Bereits vor dem Covid-19-Ausbruch lag der weltweite Umsatz der Branche bei mehr als 50 Milliarden Euro. In der Region Göttingen verfügen wir über eine bundesweit einzigartige Kompetenz auf diesem Gebiet. Das IFNANO hat daher gemeinsam mit acht KMU-Partnern, einem Großunternehmen sowie zwei weiteren akademischen Partnern aus den Bereichen Klinische Anwendung und Forschung den Südniedersachsen-Point-of-Care-Cluster initiiert. Dieser entwickelt, gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung, neue, bessere diagnostische Schnelltests mit innovativen Funktionalitäten. Der Cluster will zudem die Produktionskosten verringern und den Einsatz umweltfreundlicher Materialien intensivieren. In der Region sollen hierdurch zusätzliche Arbeitsplätze entstehen.

Eine Weltneuheit wird die adaptive Korrektur von Aberrationen für die Fluoreszenz-Korrelations-Spektroskopie (FCS) darstellen, die wir im Projekt ARIES gemeinsam mit der Bissendorfer Ionovation GmbH entwickeln. Die FCS zeigt im Pharma-Bereich durch das berührungslose Erfassen der Dynamik einzelner Moleküle, ob ein Wirkstoff ein bestimmtes Zielprotein in einer Zelle besetzt. Mitunter ist dieser molekulare Blick durch brechungsindexbedingte Trübungen verschleiert. Das soll sich durch den Einsatz von adaptiven Optiken ändern. Sämtliche hierfür benötigten Bauteile werden dabei vollständig als Einschubmodul im Inneren eines konfokalen Mikroskops untergebracht. So entsteht ein leicht zu bedienendes, dabei äußerst zuverlässiges und robustes Analysesystem für den Routineeinsatz.

Beim Verbundprojekt OMeGlas.3 entwickeln wir mit dem Berliner Unternehmen Schmidt & Haensch ein Messsystem, das die Oberflächenspannung von Glasscheiben schnell, sensitiv, robust und berührungsfrei auf der gesamten Fläche bestimmt solche

Dear Readers,

Rapid tests have been ubiquitous since the onset of the COVID-19 pandemic. But, in fact, they have long been an important tool – not only in human medicine, but also in veterinary medicine, forensics, as well as in the analysis of environmental and hazardous substances. Even before the outbreak of COVID-19, global sales in this sector exceeded 50 billion euros per year. In the Göttingen region of Germany, we possess expertise in this field that is second to none in the country. For this reason, IFNANO has collaborated with eight SME partners, one major corporation, and two other academic partners from the fields of clinical application and research to initiate the South Lower Saxony Point-of-Care Cluster. Funded by Germany's Federal Ministry of Education and Research, it is developing new and improved rapid diagnostic tests with innovative functionalities. In addition, the cluster aims to reduce production costs and increase the use of environmentally friendly materials. We expect this to create additional jobs in the region.

In the ARIES project, we are developing groundbreaking technology in collaboration with Bissendorf-based Ionovation GmbH: adaptive correction of aberrations in fluorescence correlation spectroscopy (FCS). In the pharmaceutical sector, FCS is used to determine whether an active ingredient occupies a specific target protein in a cell via the noncontact detection of the dynamics of individual molecules. Often this molecular view is obscured by refractive index-related opacities – this will change with the use of adaptive optics. All of the components required for this are housed entirely as a plug-in module inside a confocal microscope. The result is an easy-to-use, yet extremely reliable and robust analysis system suitable for everyday use.

In OMeGlas.3, a joint project with the Berlin-based company Schmidt & Haensch, we are developing a noncontact measuring system that can quickly, sensitively, and robustly determine the surface stress of glass panes over the entire surface. These systems

Vorwort

Preface

Systeme werden etwa in der Automobilindustrie benötigt, wo die Anforderungen an die Verglasung stetig steigen, da an ihr eine Vielzahl von Kameras und Sensoren für Assistenzsysteme angebracht werden. Darüber hinaus müssen die Scheiben beheizbar sein und sich verdunkeln lassen. Entspricht der Spannungshaushalt nicht den Vorgaben, kann das Glas brechen.

Unser Institut hat im vergangenen Jahr zudem eine Methode entwickelt, bei der ein planares, bereits poliertes Glassubstrat in heißem Zustand über eine zuvor aufgebraute, laserstrukturierte dünne Schicht spezifisch und irreversibel verformt werden kann. Dadurch kann beispielsweise die nachträgliche Politur von Freiformoberfläche entfallen. Freiformoberflächen vereinfachen optische Aufbauten, verbessern die Leistung und ermöglichen das Umsetzen gänzlich neuer Konzepte. Der Prozess ist zudem sehr flexibel, da kein Negativ benötigt wird. Beides hebt unser Verfahren vom bisher üblichen mechanischen Materialabtrag oder vom Abformen ab.

Zusammen mit der Abberior GmbH haben wir – in einem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz geförderten Projekt – ein künstliches neuronales Netzwerk für die Vorhersage der Zellgängigkeit von Fluoreszenzsonden geschaffen. Das Netzwerk wurde mit mehr als 300 molekularen Merkmalen trainiert und vereinfacht den Entwicklungsprozess für solche Sonden wesentlich. Die superauflösende Fluoreszenzmikroskopie benötigt sie zur bildlichen Darstellung von intrazellulären Strukturen in einer Auflösung von bis zu wenigen Nanometern. Bisher ließen sich die Sonden nur ineffektiv durch eine Vielzahl von Versuchen entwickeln, was entsprechend teuer ist.

Die vielen wissenschaftlichen Durchbrüche und Projektergebnisse wären ohne den überdurchschnittlichen Einsatz und die Brillanz unserer 58 Mitarbeitenden nicht möglich gewesen. Sie hatten auch in diesem Jahr unter den erschwerenden Pandemie-Bedingungen zu arbeiten. Daher haben wir unsere

are needed for example in the automotive industry, where the glass has to meet ever-increasing demands due to it being used to mount a large number of cameras and sensors for assistance systems. In addition, it must be possible to heat and darken the windshields. If the level of stress the glass is subjected to does not comply with the specifications, it may crack or even break.

Last year, our institute also developed a method in which a flat and already polished glass substrate can be specifically and irreversibly deformed in a hot state via a previously applied, laser-structured thin layer. This eliminates the need to subsequently polish free-form surfaces. Free-form surfaces simplify optical setups, improve performance, and make the implementation of entirely new concepts possible. The process is also extremely flexible since it does not require a negative. Both of these features set our process apart from the usual method of removing material mechanically or the use of molds.

Together with Abberior GmbH, we have created – in a project funded by Germany's Federal Ministry for Economic Affairs – an artificial neural network that can predict the cellular mobility of fluorescence probes. The network has been trained with more than 300 molecular features and dramatically simplifies the process of developing such probes. Super-resolution fluorescence microscopy requires these probes to image intracellular structures at a resolution of up to a few nanometers. Until now the development of such probes was ineffective and required a large number of trials, which is a correspondingly expensive process.

Our many scientific breakthroughs and project achievements would not have been possible without the exceptional dedication and expertise of our 58 employees. They had to work under difficult pandemic conditions this year. In order to improve the

Vorwort

Preface

Arbeitszeiten weiter flexibilisiert und die Möglichkeiten zum mobilen Arbeiten ausgebaut. Das hilft unseren Beschäftigten, Beruf und Privatleben noch besser miteinander zu vereinbaren. Für ihr beeindruckendes Engagement möchte ich mich an dieser Stelle herzlichst bedanken.

Im Vergleich zum Vorjahr konnte das IFNANO mit einem Betriebshaushaltsvolumen von 4,4 Millionen Euro sein Ergebnis leicht verbessern. Insbesondere bei den Drittmitteln aus Projekten der Europäischen Union, des Bundes und der Deutschen Forschungsgemeinschaft gelang uns eine deutliche Steigerung.

Ich wünsche Ihnen eine anregende Lektüre unseres aktuellen Jahresberichts. Das IFNANO freut sich darauf, die gute Zusammenarbeit mit seinen langjährigen Partnerinnen und Partnern fortzusetzen und hofft, neue Mitstreiter zu gewinnen.

Ihr



situation, we made work schedules even more flexible and expanded the possibility to work from home. This is helping our employees to achieve an even better work-life balance. I would like to take this opportunity to express my sincere thanks for their impressive level of commitment.

Compared to the previous year, IFNANO was able to slightly improve its annual results – with an operating budget of 4.4 million euros. In particular, we succeeded in significantly increasing third-party funding from the European Union, German Federal Government, and German Research Foundation projects.

I hope you enjoy reading our latest annual report. IFNANO looks forward to continuing our fruitful relationship with our long-time partners and attract new ones.

Yours





Leitbild IFNANO

Mission Statement



Leitbild IFNANO

Mission Statement

Exzellenz durch Zusammenarbeit

Unsere Mission ist die anwendungsorientierte Grundlagenforschung auf dem Gebiet der optischen Technologien und der Technologietransfer von der Wissenschaft in die Wirtschaft mit stark regionalem Bezug. Wir setzen Licht als Werkzeug ein und sind Experten für nanoskaliges Strukturieren, Analysieren und Abbilden mit Licht. Hier gehören wir zu den weltweit führenden Einrichtungen.

Das Institut für Nanophotonik Göttingen betreibt interdisziplinäre Spitzenforschung in Kooperation mit regionalen, nationalen und internationalen Partnern aus Industrie und Forschung und entwickelt auf diese Weise kompetitive Produkte, Lösungen und Innovationen – zum Wohl der Gesellschaft und zur Stärkung der Wirtschaft.

Wir verstehen uns insbesondere als erster Ansprechpartner für den Mittelstand bei Fragestellungen aus dem Bereich der angewandten Nanophotonik. Mit unseren Kunden und Partnern arbeiten wir vertrauensvoll, schnell und effektiv zusammen.

Die regionale Wirtschaft profitiert von uns durch Wissenstransfer und exzellent ausgebildete Absolventen. Wir initiieren und unterstützen den Dialog und Erfahrungsaustausch über alle Themen der optischen Technologien.

Wir bieten eine industrienah wissenschaftliche Ausbildung auf höchstem Niveau. Unser Erfolg basiert auf dem Wissen und dem Engagement unserer Mitarbeitenden. Ihre Fähigkeiten und ihre Begeisterung, ein offener Austausch und ein ausgezeichnetes Arbeitsumfeld schaffen die Grundlage für kreative Lösungen von wissenschaftlichen und technologischen Fragestellungen.

Excellence through Collaboration

Our mission is to conduct application-oriented basic research in the field of optical technologies and to transfer technology from science to industry with a strong regional focus. We use light as a tool and are experts in nanoscale structuring, analyzing, and imaging with light. In this field, we are one of the world's leading research facilities.

The Institute for Nanophotonics Göttingen conducts cutting-edge interdisciplinary research in collaboration with regional, national, and international partners from industry and research, and in doing so develops competitive products, solutions, and innovations – for the good of society and to strengthen the economy.

We primarily view ourselves as the first point of contact for small and medium-sized enterprises for all matters in the field of applied nanophotonics. We work with our customers and partners in a trusting, fast, and highly effective manner.

The regional economy benefits from our activities through the transfer of knowledge and exceptionally well-trained graduates. We initiate and facilitate dialog and knowledge sharing on all topics related to optical technologies.

We offer an industry-oriented scientific education of the highest caliber. Our success is based on the knowledge and dedication of our employees. Their skills and enthusiasm, a spirit of open communication, and an excellent working environment create the foundation for developing creative solutions to scientific and technological challenges.

Institutsstruktur Institution Structure

INSTITUT FÜR NANOPHOTONIK GÖTTINGEN E.V. (IFNANO)

Trägerverein - Vorstand



Prof. Dr. J. Troe
Vorstandsvorsitzender
Universität



Dr. Bernd Stoffregen
Schatzmeister
Industrie



Prof. Dr. S.W. Hell
Vorstandsmitglied
Max-Planck Gesellschaft



Prof. Dr. C. Ropers
Vorstandsmitglied
Max-Planck Gesellschaft



Prof. Dr. Tim Salditt
Vorstandsmitglied
Universität

Institutsleitung



Apl. Prof. Dr. Alexander Egner
Institutsdirektor



Roland Becker
Verwaltungsleiter

Kompetenzfelder



Apl. Prof. Dr.
Alexander Egner
Optische Nanoskopie



Dr.
Claudia Geisler
Optische Nanoskopie



Dr.
Carola Gregor
Optische Nanoskopie



Dr.
Peter Simon
Kurze Pulse/Nanostrukturen



Dr.
Jürgen Ihlemann
Kurze Pulse/Nanostrukturen



Dr.
Klaus Mann
Optik/Kurze Wellenlängen



Dr.
Hainer Wackerbarth
Photonische Sensorik

KURATORIUM

**Prof. Dr. Peter Loosen**

Vorsitzender

Fraunhofer Institut für Lasertechnik
Aachen**Prof. Dr. Philippe Bastiaens**

Kurator

Max-Planck-Institut für molekulare Physiologie
Dortmund**Dr. Dietmar Gnass**

Kurator

Polytec GmbH
Waldbronn**Prof. Dr. Thomas A. Klar**

Kurator

Universität Linz
Österreich**Prof. Dr. Andrea Koch**

Kuratorin

HAWK Hochschule für angewandte Wissenschaft und Kunst
Hildesheim/Holzminen/Göttingen**Prof. Dr. Sarah Köster**

Kuratorin

Georg-August-Universität
Göttingen

Das Institut in Zahlen

Statistics of the Institute



Roland Becker
Verwaltungsleiter

T +49 551/5035-33
F +49 551/5035-99
M roland.becker@ifnano.de

MITARBEITENDE / STAFF MEMBERS

Dirk Born
Tatjana Kasten
Uwe Lampe
Olaf Mädiger

Andreas Spata
Jutta Steckel
Anette Zwingmann



Betriebshaushalt

Der Betriebshaushalt im Jahr 2021 hatte ein Volumen von 4,37 Millionen Euro. Die Grundfinanzierung als ein wichtiger Bestandteil wird als institutionelle Förderung vom Land Niedersachsen bereitgestellt. Der Finanzierungsanteil der eigenen Einnahmen am Betriebshaushalt lag bei 64,4 %. Die Einnahmen aus der Industrie trugen mit 12,5 % zur Finanzierung bei.

Investitionen

Im Jahr 2021 wurden Investitionen in die kontinuierliche Erweiterung der technologischen Ausstattung im Gesamtumfang von 0,38 Millionen Euro getätigt.

Personal

Am Institut für Nanophotonik Göttingen waren zum Stichtag 31.12.2021 insgesamt 58 Mitarbeiter beschäftigt, davon 43 Wissenschaftler und Techniker, was einem Anteil von 74,1 % an den Gesamtbeschäftigten entspricht. Die wissenschaftlichen Mitarbeiter verfügen mehrheitlich über einen Abschluss als M. Sc. Physik. Darüber hinaus arbeiten am Institut graduierte Photoniker, Chemiker, Informatiker und Kaufleute, die in interdisziplinären Forschungsgruppen tätig sind.

Ausbildung und Qualifikation

Das IFNANO bietet Studentinnen und Studenten die Möglichkeit, ihr Studium mit praktischer wissenschaftlicher Arbeit in den Laboren und Werkstätten des IFNANO zu verbinden. Zum Jahresende 2021 wurden zehn wissenschaftliche und studentische Hilfskräfte betreut. Darüber hinaus konnte am IFNANO in 2021 eine Promotion in Kooperation mit der Georg-August-Universität Göttingen abgeschlossen werden.

Operating budget

The operating budget in 2021 had a volume of 4.37 million euros. The basic funding as an important component is provided by the German State of Lower Saxony as an institutional grant. The financing share of own revenues in the operating budget was 64.4 %. Revenues from industry contributed 12.5 % to the financing.

Investments

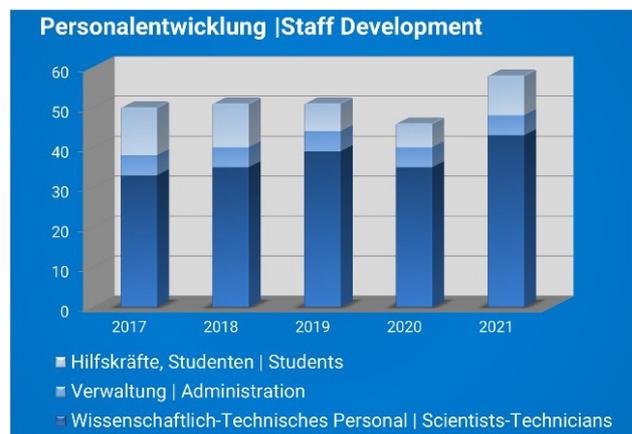
In 2021, a total of 0.38 million euros was invested in the continuous expansion of the technological equipment.

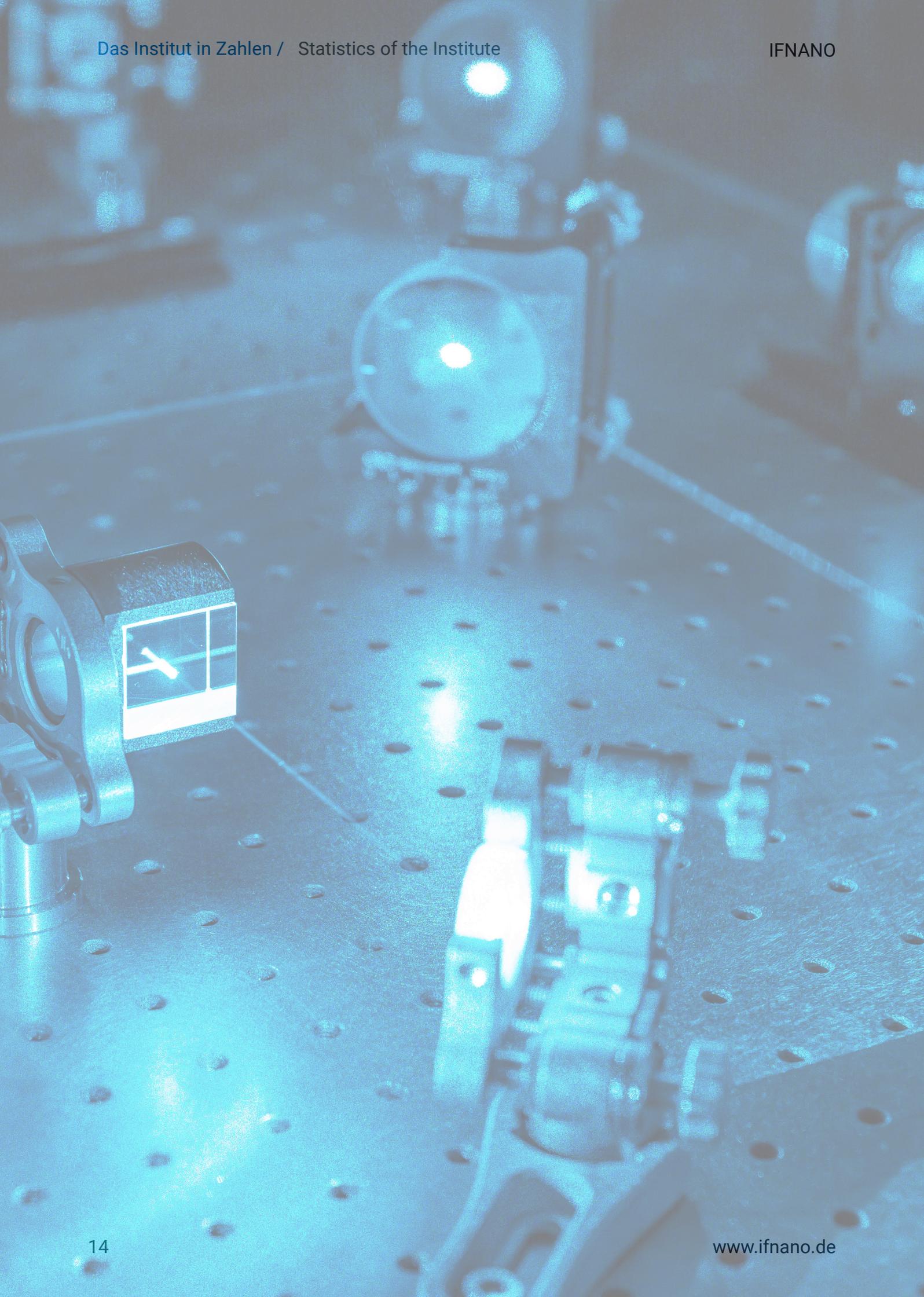
Staff

At the end of 2021, the Institut für Nanophotonik Göttingen had 58 employees, 43 of them scientists and technicians, which corresponds to 74.1 % of the total number of employees. Most of the scientific staff have an MSc degree in physics. In addition, graduated photonics, chemists specialists, computer scientists and business people work in interdisciplinary research groups at the institute.

Training and qualifications

The IFNANO offers students the opportunity to combine their studies with practical scientific work in the IFNANO laboratories and workshops. At the end of 2021, ten students and research assistants were supervised at the IFNANO. In addition, two doctoral thesis was deferred in cooperation with the Georg August Universität Göttingen.



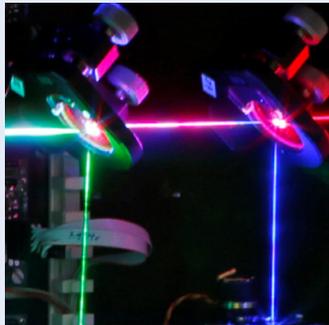


Die Abteilungen

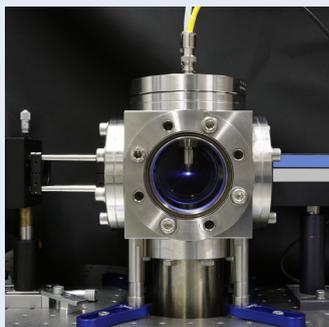
The Departments



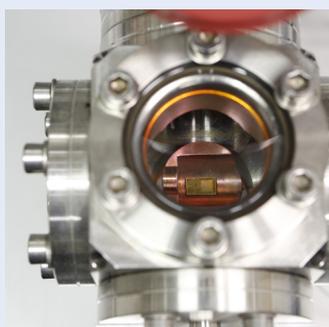
Optische Nanoskopie
Optical Nanoscopy



Kurze Pulse / Nanostrukturen
Short Pulses / Nanostructures



Optik / Kurze Wellenlängen
Optics / Short Wavelengths



Photonische Sensorik
Photonic Sensor Technologies

Berichte aus der Abteilung Departmental Reports



Apl. Prof. Dr. Alexander Egner
Institutsdirektor
Abteilungsleiter

T +49 551/5035-35
F +49 551/5035-99
M alexander.egner@ifnano.de

Dr. Claudia Geisler
Abteilungsleiterin

T +49 551/5035-65
F +49 551/5035-99
M claudia.geisler@ifnano.de



MITARBEITENDE / STAFF MEMBERS

Dr. Mark Bates

Debadrita Ghosh

Ayiben Nuerbahati

Dr. Carola Gregor

Parul Jain

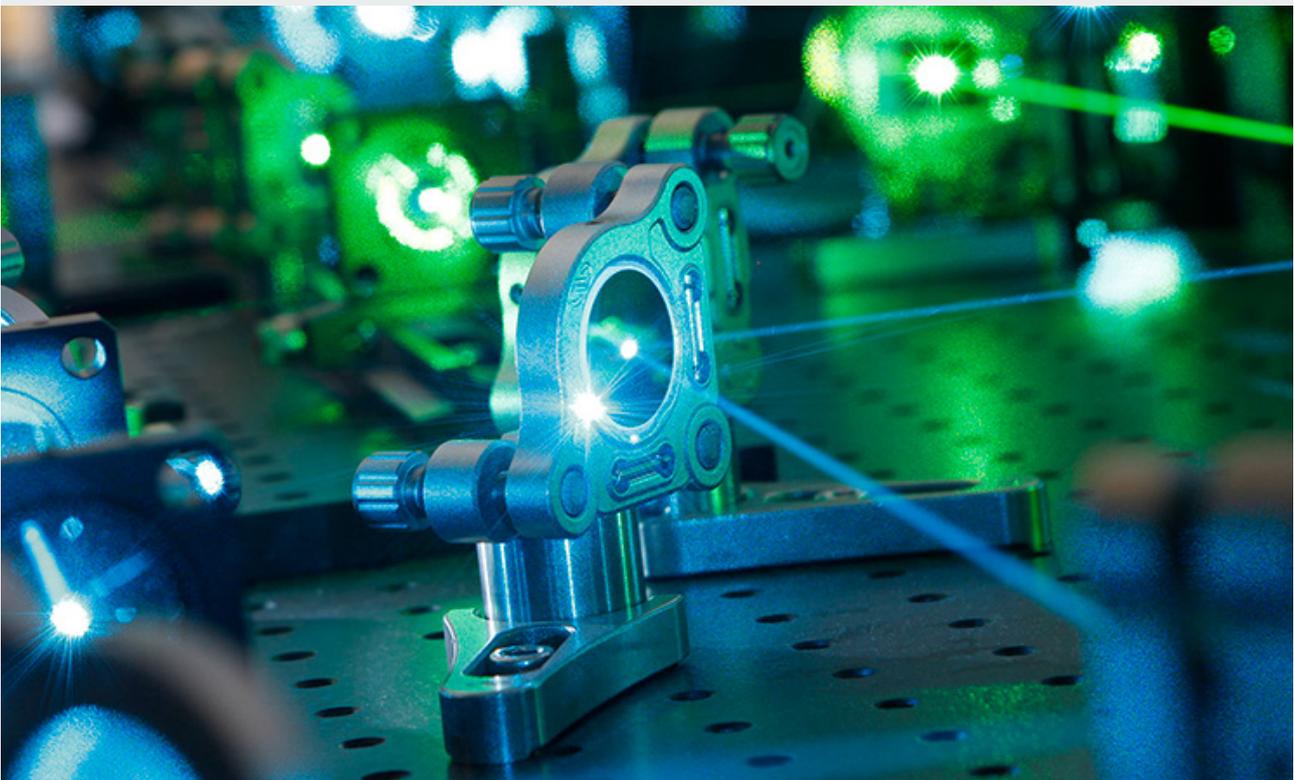
Lenny Reinkensmeier

Dr. René Siegmund

Luica Kark

Theresa Brinker

Julia Kratz



Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Das Beobachten der Nanowelt im Inneren von (lebenden) Zellen eröffnet einmalige Möglichkeiten zum Verständnis der dort ablaufenden molekularen Prozesse. Dieser Erkenntnisgewinn ist einer der Schlüssel zum Verständnis von Krankheiten und zur Entwicklung neuer diagnostischer Verfahren, neuer Medikamente und ihrer therapeutischen Anwendung. Die konventionelle Lichtmikroskopie hat sich in den Lebenswissenschaften als ein unverzichtbares Instrument bewährt, leidet jedoch unter einer entscheidenden Einschränkung: Die durch die Wellennatur des Lichts auf 200–300 nm begrenzte Auflösung verschließt dem Betrachter die entscheidende Größenskala: die Nanowelt bleibt verborgen.

Die hochauflösende Fluoreszenzmikroskopie umgeht diese Limitierung und bedient sich hierzu eines Tricks: Die Eigenschaften fluoreszierender Markermoleküle werden derart ausgenutzt, dass die Informationen, die sich innerhalb des Bereichs eines verwaschenen Lichtflecks befinden, sequenziell ausgelesen werden können. Die Auflösung des "optischen Nanoskops" ist dadurch nicht mehr durch die Beugung limitiert und der Blick in die Nanowelt der Zelle wird scharf. Für die Entwicklung der hochauflösenden Fluoreszenzmikroskopie wurden 2014 Stefan W. Hell, Eric Betzig und William E. Moerner mit dem Chemie-Nobelpreis ausgezeichnet. Die Abteilung "Optische Nanoskopie" befasst sich mit der anwendungsorientierten Grundlagenforschung auf diesem Gebiet und erweitert das Methodenspektrum innerhalb der hochauflösenden Fluoreszenzmikroskopie.

Taking a close look at the nanoworld within (living) cells provides fantastic possibilities for gaining insight into ongoing molecular processes. This knowledge is one of the keys to understanding diseases and developing new diagnostic tools, novel drugs, and their therapeutic uses. Conventional light microscopy has emerged as an indispensable tool in the life sciences; however, it suffers from one major drawback. The light microscope's resolution is limited to 200–300 nm due to the wave nature of light. Therefore, the crucial dimensions stay out of reach for the observer: the nanoworld remains hidden.

Superresolution fluorescence microscopy avoids this limitation by using a trick. The properties of fluorescent markers are used such that the information within a diffraction-limited spot is read out sequentially. As a result, the resolution of the "optical nanoscope" is no longer diffraction limited and the nanoworld is revealed. In 2014, Stefan W. Hell, Eric Betzig, and William E. Moerner were awarded the Nobel Prize in Chemistry for the development of superresolution fluorescence microscopy. The department of "Optical Nanoscopy" places emphasis on basic research and applications in this field and develops new methods for high-resolution fluorescence microscopy.

Optische Nanoskopie

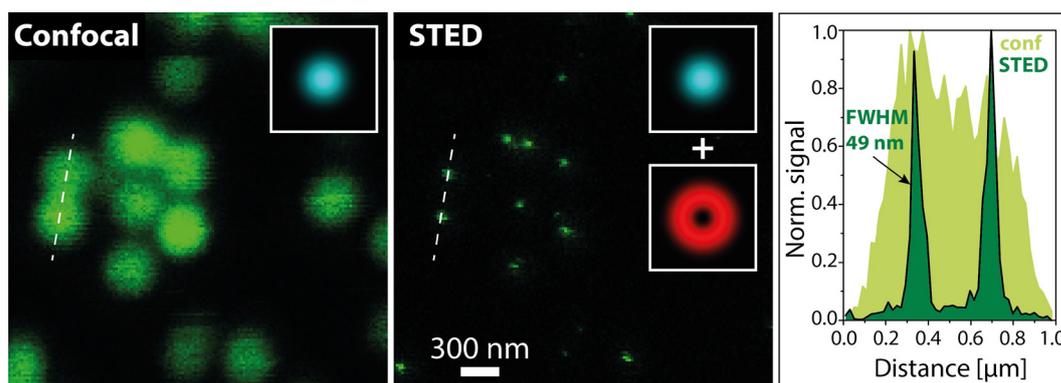
Optical Nanoscopy

Nanoskopie mittels stimulierter Emission: STED-Mikroskopie

Die STED-Mikroskopie ist die prominenteste Variante der ensemblebasierten Nanoskopiemethoden und erlaubt routinemäßig eine Auflösungssteigerung um mindestens eine Größenordnung. Sie nutzt den Prozess der stimulierten Emission, um Fluoreszenzmarker von einem hellen fluoreszierenden in einen dunklen nichtfluoreszierenden Zustand zu überführen. Typischerweise werden Fluorophore zunächst mit einem fokussierten Laserstrahl angeregt. Durch Überlagerung dieses Anregungsfokus mit einem weiteren Laserfokus werden angeregte Fluorophore durch stimulierte Emission am Fluoreszieren gehindert. Hat dieser sogenannte STED-Laserfokus eine Ringform mit einer zentralen Intensitätsnull, so werden Moleküle am Rand ausgeschaltet, Moleküle im Zentrum aber nicht beeinflusst. Daraus ergibt sich eine räumliche Einengung des fluoreszierenden Bereichs, was gleichbedeutend mit einer Auflösungsverbesserung ist. Zur Bilderstellung wird dieser eingengte fluoreszierende Bereich pixelweise durch das Bildfeld gerastert.

Nanoscopy using stimulated emission: STED microscopy

STED microscopy is the most prominent technique among the ensemble-based nanoscopy methods and routinely achieves a resolution increase of at least one order of magnitude. It uses stimulated emission to "switch" fluorescent markers from a bright, fluorescent state to a dark, nonfluorescent state. Typically, fluorophores are excited by a focused laser beam. By superimposing this excitation focus with another laser focus, the excited fluorophores are prevented from fluorescing by stimulated emission. If this so-called STED laser focus has a ring shape with a central intensity zero, molecules at the rim are switched off, while molecules in the center are not influenced. This results in a spatial narrowing of the fluorescent area, which is synonymous with an improvement in resolution. The STED image is recorded by scanning the confined fluorescent spot through the field of view pixel by pixel.



Konfokales (links) und STED-Bild (Mitte) von fluoreszierenden Kugeln. Die Einsatzbilder zeigen die jeweils verwendeten fokalen Intensitätsverteilungen (Anregung: cyan, STED: rot). Der Graph rechts veranschaulicht die Auflösungsverbesserung anhand von Intensitätsprofilen entlang der gestrichelten weißen Linien.

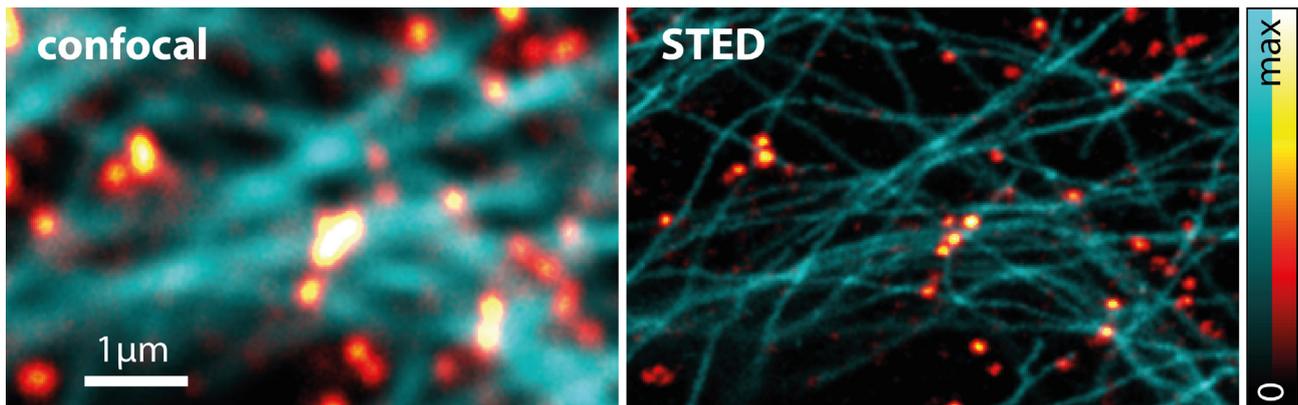
Confocal (left) and STED image (center) of fluorescent microspheres. The insets show the focal intensity distributions used in each case (excitation: cyan, STED: red). The graph (right) illustrates the resolution improvement with the help of intensity profiles along the dashed white lines.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Die Auflösung des STED-Bildes, die durch die Ausdehnung des fluoreszierenden Bereichs bestimmt wird, hängt somit von der Intensität des STED-Strahls und den photophysikalischen Eigenschaften der verwendeten Fluoreszenzmarker ab. Theoretisch kann die Auflösung beliebig gut werden und experimentell werden derzeit problemlos wenige zehn Nanometer erreicht. Für viele biologische Fragestellungen ist es interessant, die relative räumliche Verteilung zweier unterschiedlicher Proteinsorten in hoher Auflösung zu untersuchen. Aus einer farbkodierten Ortsdarstellung lassen sich dann Rückschlüsse auf die Funktion und Interaktion der Proteine ziehen. Unsere technische Realisierung eines entsprechenden STED-Mikroskops erreicht Hochauflösung in zwei Farbkanälen mit nur einem STED-Laser. Die Überlagerung beider Kanäle ist dadurch unabhängig von Justage und chromatischen Aberrationen. Zudem werden sie quasisimultan mit minimalem Übersprechen aufgenommen, wovon die Bildqualität und die Nutzerfreundlichkeit des Mikroskops deutlich profitieren.

The resolution of the STED image, which is given by the extent of the fluorescent area, therefore depends on the applied STED intensity and the photophysical properties of the fluorophore. Theoretically, the resolution can get as good as required, and experimentally, a few tens of nanometers can currently be achieved without any problem. For many biological questions, it is interesting to investigate the relative spatial distribution of two different types of proteins at high resolution. From the color-coded images, conclusions can then be drawn regarding the protein's function and interaction. Our technical implementation of a suitable STED microscope achieves high resolution in two color channels with only one STED laser. Thus, the overlap of both channels is independent of alignment and chromatic aberrations. Also, both are acquired quasi-simultaneously with minimal crosstalk, from which the image quality and user-friendliness benefit tremendously.



▲ Zweifarbige Mikroskopbild in konfokaler Auflösung (links) und in Hochauflösung (rechts). Gezeigt sind das Mikrotubulinetzwerk (cyan) und Clathrin (gelb-rot) in einer U2-OS-Zelle.
Two-color microscopy image in confocal (left) and in high resolution (right). Shown are the microtubule network (cyan) and clathrin (yellow-red) in a U2-OS cell.

Optische Nanoskopie Optical Nanoscopy

Tomographische STED-Mikroskopie profitiert von der Image-Scanning-Mikroskopie

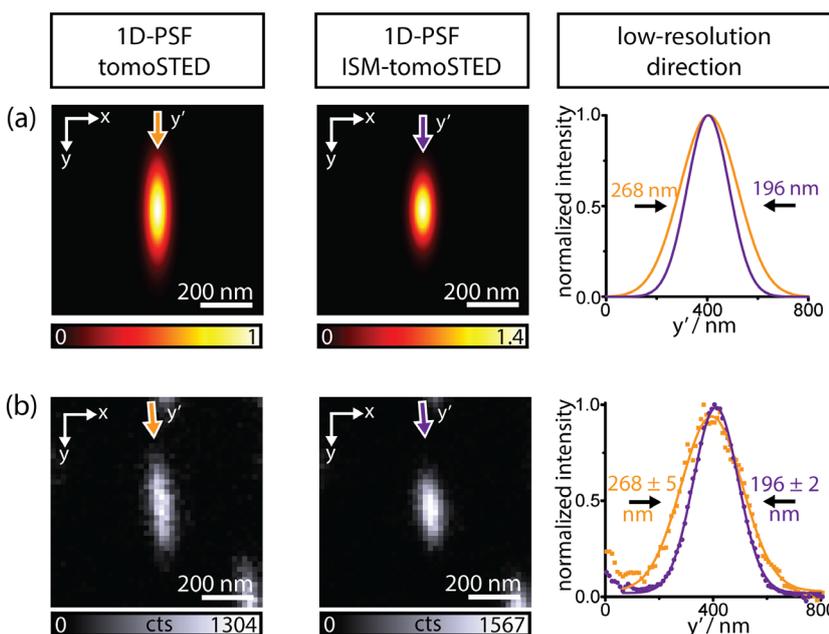
Die tomographische STED-Mikroskopie ist eine probenschonende Variante der STED-Mikroskopie und erreicht die gleiche Bildqualität bei nur einem Viertel der Lichtdosis. Dies ist insbesondere vorteilhaft für biologische Anwendungen, bei denen oft das Photobleichen und lichtinduzierte Probenschädigungen die Qualität der Bildgebung limitieren.

Das Grundprinzip der tomoSTED-Mikroskopie basiert darauf, dass der fluoreszierende Bereich zu jedem Zeitpunkt nur in einer Richtung eingeschränkt wird statt wie in der klassischen STED-Mikroskopie in zwei Richtungen. Ein zweidimensional hochaufgelöstes Bild lässt sich aus einer Serie von Einzelbildern rekonstruieren, die jeweils eine unterschiedliche Orientierung der hochaufgelösten Richtung haben. Die Anzahl der hierfür erforderlichen Richtungen hängt dabei von der gewünschten Winkelhomogenität der Punktbildfunktion (PSF) bzw. der optischen Übertragungsfunktion und damit von der Auflösungssteigerung im Vergleich zur beugungsbegrenzten Abbildung ab.

Tomographic STED Microscopy benefits from image-scanning microscopy

Tomographic STED microscopy is a sample-gentle variant of STED microscopy, that achieves the same image quality at only one quarter the light dose. This is particularly beneficial for biological applications in which photobleaching and light-induced sample damage often limit the imaging performance.

The principle of tomoSTED microscopy is based on the fact that the fluorescent area is confined in only one direction at any given time. This is in contrast to classical STED microscopy, where confinement is applied to two dimensions simultaneously. A super-resolved two-dimensional image is then reconstructed from a series of single images, each exhibiting a different orientation of the high-resolution direction. The number of orientations required for reconstruction depends on the desired angular homogeneity of the point spread function (PSF) or the optical transfer function and thus on the resolution increase as compared to diffraction-limited imaging.



Application of the ISM principle to individual tomoSTED PSFs. (a) Simulated and (b) experimentally determined tomoSTED and ISM-tomoSTED 1D-PSFs and corresponding line profiles. Arrows in orange and purple indicate the low-resolution direction (here denoted as y'). The resolution improvement due to ISM is clearly visible.

Optische Nanoskopie

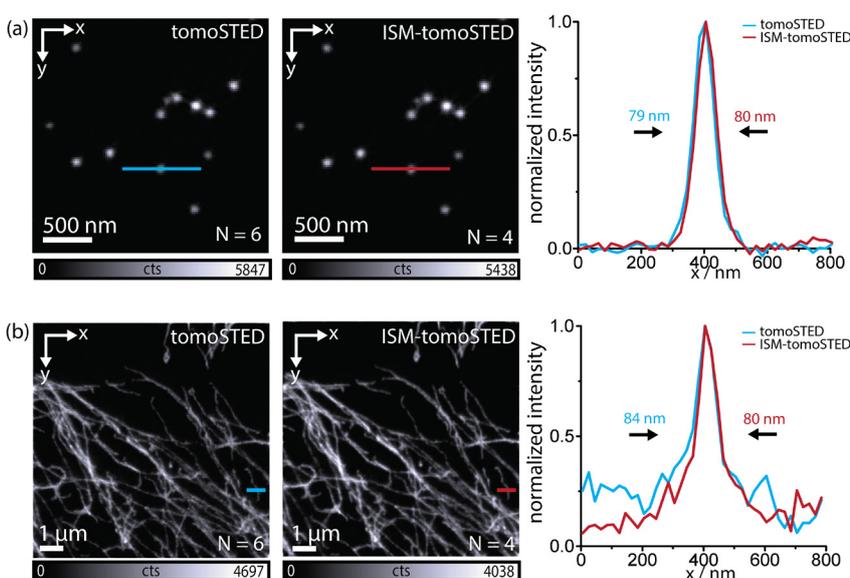
Optical Nanoscopy

Die Methode bietet eine interessante Möglichkeit zur weiteren Verbesserung: Es ist bekannt, dass die Image-Scanning-Mikroskopie (ISM) die beugungslimitierte Auflösung eines Rastermikroskops um bis zu einem Faktor $\sqrt{2}$ verbessern kann, ohne dabei Fluoreszenzsignal einzubüßen. In einem vom BMWi geförderten Projekt kombinierten wir daher die tomoSTED-Mikroskopie mit dem ISM-Prinzip. Dazu implementierten wir ein tomoSTED-Mikroskop mit ISM-Detektion und erweiterten die ISM-Rekonstruktionsalgorithmen auf asymmetrische Punktverteilungsfunktionen beliebiger Orientierung.

Wir konnten zeigen, dass sich die durch ISM-Unterstützung verbesserte Auflösung in beugungslimitierter Richtung in eine geringere Zahl an für die Rekonstruktion erforderlichen Einzelbilder übertragen lässt. Hierdurch reduziert sich die Bildaufnahmezeit entsprechend. Sowohl in Simulationen als auch im Experiment liegt die Verbesserung in etwa bei einem Faktor von $\sqrt{2}$. Unter typischen Aufnahmebedingungen entspricht dies insgesamt einer sechsfachen Reduzierung der benötigten Lichtdosis im Vergleich zu einem klassischen STED-Mikroskop.

The method offers an interesting possibility for further improvement: it is well known that image-scanning microscopy (ISM) enables improving the resolution of a scanning microscope by a factor of $\sqrt{2}$ without loss in fluorescence signal. Within a project funded by the BMWi, we therefore combined tomo-*STED* microscopy with the ISM concept. To this end, we implemented a tomo-*STED* microscope with ISM detection and extended the ISM reconstruction algorithms to asymmetric point spread functions of arbitrary orientation.

We have shown that the ISM-improved resolution along the diffraction-limited direction translates into a reduction of the number of orientations needed for reconstruction. Thus, the total acquisition time is accordingly reduced. Both in simulations as well as in experiments, the improvement is approximately a factor of $\sqrt{2}$. Under typical image acquisition conditions, this corresponds to an overall six-fold reduction of the required light dose as compared to a classical *STED* microscope.



◀ Hochaufgelöste Bilder (a) von fluoreszierenden Mikrokugeln und (b) vom fluoreszenzmarkierten Mikrotubulinetzwerk zeigen eine vergleichbare Auflösung und Bildqualität für tomo-*STED*-Aufnahmen mit sechs Orientierungen und für ISM-tomo-*STED*-Aufnahmen mit vier Orientierungen.

Super-resolved images of (a) fluorescent microspheres and (b) the fluorescent-labeled microtubule network show comparable resolution and image quality for tomo-*STED* imaging with six orientations and for ISM-tomo-*STED* imaging with four orientations.

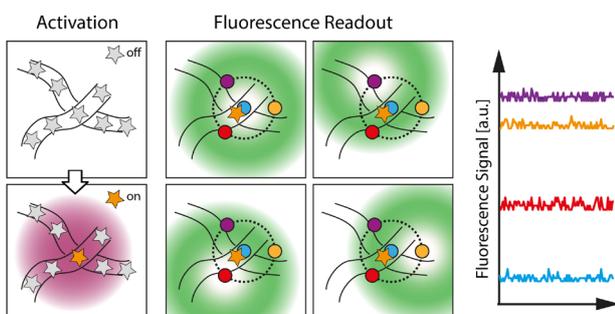
Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

MINFLUX-Nanoskop der nächsten Generation für die Bakteriologie

Die neueste Entwicklung auf dem Gebiet der Nanoskopie trägt den Namen MINFLUX und ermöglicht die Abbildung spezifischer Proteine oder sogar Epitope innerhalb von Proteinen mit einer Auflösung von bis zu 1-3 nm. Im Vergleich zur STED-Mikroskopie verbessert sie damit die erreichbare Auflösung um eine weitere Größenordnung und verwirklicht das ultimative Ziel der biomedizinischen Bildgebung: die dreidimensionale Bildgebung in lebenden Zellen auf Längenskalen, die mit denen einzelner funktioneller Einheiten innerhalb biologischer Makromoleküle vergleichbar sind.

Das MINFLUX-Prinzip basiert darauf, dass einzelne Farbstoffmoleküle zufällig in ihren fluoreszenzfähigen Zustand geschaltet werden. Die laterale Position eines Moleküls wird dann iterativ unter Verwendung eines ringförmigen Anregungsfokus bestimmt, wobei kein Fluoreszenzsignal detektiert wird, wenn sich das Molekül genau im Ringzentrum befindet. Die axiale Position wird in ähnlicher Weise ermittelt. Dieser Ansatz bringt die Vorteile mit sich, dass keine hohen Lichtintensitäten benötigt werden, weswegen MINFLUX inhärent lebendzellkompatibel ist, und dass keine besonderen Anforderungen an die Photostabilität und Helligkeit der eingesetzten Farbstoffmoleküle gestellt werden.



Next-generation MINFLUX nanoscope for bacteriology

The latest development in the field of nanoscopy is called MINFLUX and enables imaging of specific proteins or even epitopes within proteins with a resolution of up to 1-3 nm. Compared to STED microscopy, it thus improves the achievable resolution by another order of magnitude and realizes the ultimate goal of biomedical imaging: three-dimensional imaging in living cells at length scales comparable to those of individual functional units within biological macromolecules.

The MINFLUX principle is based on randomly switching individual dye molecules to their fluorescent state. The lateral molecule position is then determined iteratively using a ring-shaped excitation focus, with no fluorescence signal detected if the molecule is located exactly in the center of the ring. The axial position is determined in a similar manner. This approach has the advantage that it does not require high light intensities, which makes MINFLUX inherently live-cell compatible, and that it does not impose any special requirements on the photostability and brightness of the dye molecules used.

Prinzip der MINFLUX-Mikroskopie. (A) Einzelne Moleküle werden zunächst zufällig von einem nichtfluoreszenzfähigen in einen fluoreszenzfähigen Zustand gebracht. Anschließend wird ein ringförmiger Anregungsfokus geringer Intensität eingestrahlt. Solange sich das aktivierte Molekül in der Mitte des Rings befindet, wird keine Fluoreszenz erzeugt. Andernfalls wird eine zur lokalen Anregungsintensität proportionale Zahl von Fluoreszenzphotonen emittiert. Durch Positionierung des Ringzentrums an vier Positionen (vgl. blaue, violette, rote und gelbe Punkte) und Detektion des jeweiligen Fluoreszenzsignals (siehe Diagramm) kann die laterale Molekülposition bestimmt werden. (Darstellung angelehnt an Balzarotti et al., Science 355(6325), 2017)
 Concept of MINFLUX microscopy. (A) Individual molecules are driven from their nonfluorescent to their fluorescent state. Then, fluorescence is probed with a low-intensity ring-shaped excitation laser. While the activated molecule resides within the center of the ring, no fluorescence is detected. Otherwise, a number of fluorescence photons proportional to the local excitation intensity are emitted. By positioning the ring center at four positions (cf. blue, purple, red and yellow dots) and detecting the respective fluorescence signal (see diagram), the lateral molecule position can be determined. (Illustration adapted from Balzarotti et al., Science 355(6325), 2017)

Optische Nanoskopie

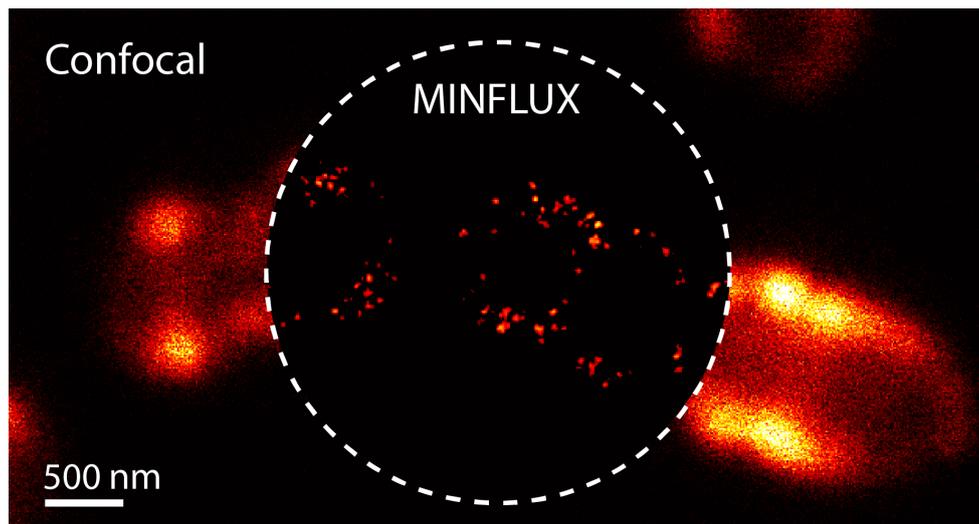
Optical Nanoscopy

Im Rahmen eines EU-geförderten Projekts arbeiten wir zurzeit zusammen mit Partnern aus Schweden, der Schweiz und Deutschland an der methodischen Weiterentwicklung der MINFLUX-Mikroskopie. Ziel des Projekts ist eine Nanoskopie-Plattform, die für die Untersuchung der Mechanismen, die bakteriellen Krankheiten wie z. B. Pneumokokken-Infektionen zugrunde liegen, optimiert ist. Für diesen Zweck wird geräteseitig eine im Vergleich zum Stand der Technik verbesserte Eindringtiefe sowie eine Kombination mit komplementären Kontrastmethoden angestrebt.

Die neue Nanoskopie-Plattform soll perspektivisch einen entscheidenden Schritt hin zu einer besseren Diagnostik, wirksamen Behandlung und Vorbeugung von schweren bakteriellen Infektionen, die weltweit eine erhebliche Morbidität und Mortalität verursachen, ermöglichen. Außerdem wird erwartet, dass die Fähigkeit zur Korrelation von nanoskaligen Proteinlokalisationen in Zellen mit der Zellmorphologie neue Wege zum Verständnis, zur Diagnose und zur Vorbeugung vieler anderer Krankheiten eröffnen wird.

Within the framework of an EU-funded project, we are currently working on the further methodological development of MINFLUX microscopy together with partners from Sweden, Switzerland, and Germany. The goal of the project is a nanoscopy platform that is optimized for the investigation of the mechanisms underlying bacterial diseases, such as pneumococcal infections. For this purpose, instrument development will aim for an improved penetration depth as compared to the state of the art, as well as a combination with complementary contrasting techniques.

The new nanoscopy platform is expected to provide a decisive step towards better diagnosis, effective treatment, and prevention of serious bacterial infections that cause significant morbidity and mortality worldwide. In addition, the ability to correlate nanoscale protein localization in cells with cellular morphology is believed to open new means to understand, diagnose and prevent many other diseases.



▲
Konfokale und MINFLUX-Aufnahme von Bakterien (*Streptococcus pneumoniae*), in denen das Oberflächenprotein PspC2 fluoreszenzmarkiert wurde. Während das konfokale Bild vergleichsweise unscharf erscheint, ist die Verteilung der Proteine im MINFLUX-Bild detailliert erkennbar. (Probe bereitgestellt von J. Widengren, KTH, Schweden)
Confocal and MINFLUX image of bacteria (*streptococcus pneumoniae*) that were fluorescently labeled for the surface protein PspC2. Whereas the confocal image looks comparably blurred, the protein distribution can be seen in detail in the MINFLUX image. (Sample provided by J. Widengren, KTH, Sweden).

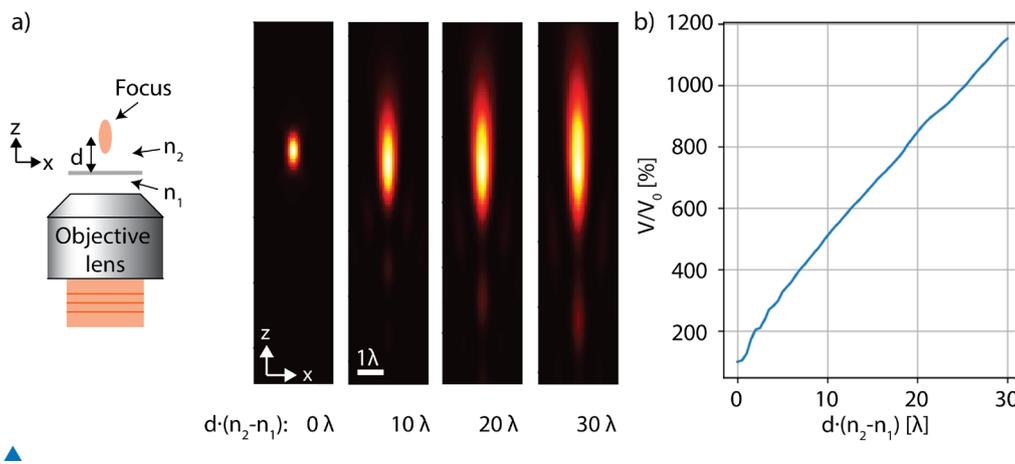
Optische Nanoskopie Optical Nanoscopy

Aberrationskorrektur für die Fluoreszenz-Korrelations-Spektroskopie

Die Fluoreszenz-Korrelations-Spektroskopie (FCS) ist ein optisches Messverfahren, das häufig in den Lebenswissenschaften eingesetzt wird. Sie ist in der Lage, die Dynamik einzelner Moleküle berührungslos zu erfassen, was insbesondere für die Entwicklung von Medikamenten von entscheidender Bedeutung ist. Um zu zeigen, dass ein potenzieller Wirkstoff ein bestimmtes Zielprotein in einer Zelle oder einem Gewebe besetzt und darüber seine Wirksamkeit entfaltet, müsste diese Interaktion idealerweise direkt in dieser Umgebung verfolgt werden. Bei Messungen in Zellen oder Gewebe verfälschen jedoch probeninduzierte Abbildungsfehler sehr häufig die Ergebnisse und verhindern somit eine genaue Analyse. Aus diesem Grund werden potenzielle Wirkstoffe meist nur in einem biochemischen Modellsystem aus funktionalisierten Derivaten untersucht. Aus dem Kontext der Zelle gerissen sind diese isolierten und gereinigten Komponenten bezüglich Interaktion und Bindungskinetik experimentell zwar gut zugänglich, doch werden so die in-vivo-Verhältnisse nicht realitätsgetreu widerspiegelt.

Aberration correction for fluorescence correlation spectroscopy

Fluorescence correlation spectroscopy (FCS) is an optical measurement technique that is frequently used in the life sciences. It is capable of contactless detection of the dynamics of single molecules, which is particularly important for drug development. In order to show that a potential agent binds to a specific target protein in a cell or tissue, and thereby demonstrates its effectiveness, this interaction would ideally have to be monitored directly in this environment. However, in the case of measurements in cells or tissue, sample-induced aberrations very often distort the results and thus prevent an accurate analysis. For this reason, potential agents are usually only investigated in a biochemical model system consisting of functionalized derivatives. Taken out of the cellular context, these isolated and purified systems are experimentally well accessible with respect to interaction and binding kinetics, but they do not realistically reflect the in vivo conditions.



Verschlechterung des Laserfokus durch Aberrationen, die durch einen nichtangepassten Brechungsindex entstehen, in Abhängigkeit vom Brechungsindexunterschied und von der Tiefe in der Probe für Licht der Wellenlänge λ (Simulation). (a) Schema und beispielhafte fokale Intensitätsverteilungen. (b) Das Fokusvolumen nimmt mit größerem Brechungsindexunterschied und größerer Tiefe in der Probe deutlich zu.

Deterioration of the laser focus due to aberrations caused by a refractive index mismatch depending on the refractive index difference and the depth in the sample for light of wavelength λ (simulation). (a) Schematic and exemplary focal intensity distributions. (b) The focal volume increases significantly with a larger refractive index difference and greater depth in the sample.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

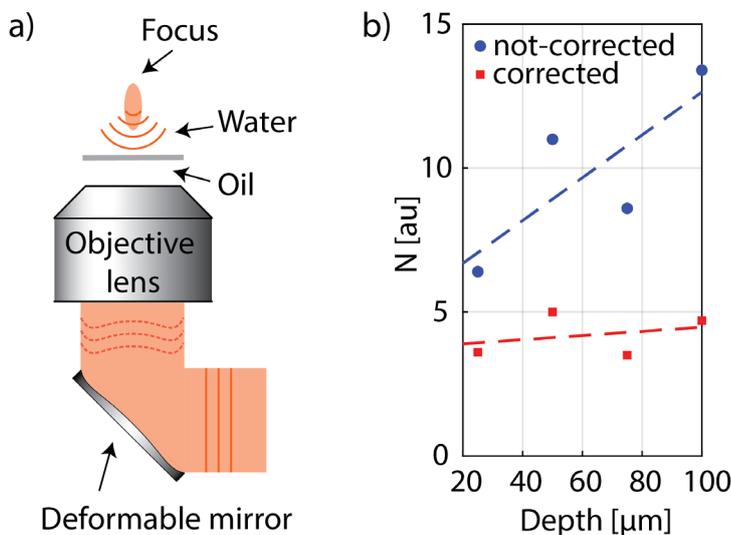
Um dieses Problem zu lösen und den molekularen Blick in die Zelle für die FCS zu schärfen, forschen wir gemeinsam mit der Ionovation GmbH im Rahmen eines Projekts, das aus Mitteln des Europäischen Fonds für regionale Entwicklung gefördert wird, an einer Methode zur Korrektur von Abbildungsfehlern. Wir verwenden dafür verformbare Spiegel, die bereits in der Mikroskopie und Nanoskopie erfolgreich eingesetzt werden und in der Lage sind, Abbildungsfehler computergesteuert und in Echtzeit zu korrigieren. Der FCS-Laserstrahl wird zunächst von der Oberfläche des verformbaren Spiegels reflektiert, bevor er in die Probe fokussiert wird, um Fluoreszenz anzuregen. Durch feedbackgesteuerte gezielte Verformung der Spiegeloberfläche wird die Laser-Wellenfront derart modifiziert, dass probeninduzierte Aberrationen kompensiert werden und ein optimaler, beugungslimitierter Fokus in der Probe entsteht.

Perspektivisch sollen dadurch Messungen der Moleküldynamik in lebenden Zellen oder Gewebe ermöglicht werden und auch im Rahmen von industriellen Hochdurchsatz-Screenings eingesetzt werden können.

In order to solve this problem and to sharpen the molecular view into the cell for FCS, we cooperate with the Ionovation GmbH on a research project on aberration correction which is funded by the European Regional Development Fund.

Deformable mirrors, which are already successfully applied in microscopy and nanoscopy and are capable of correcting aberrations in a computer-controlled manner and in real time, are used by us for this purpose. The FCS laser beam is first reflected by the deformable surface, before it is focused into the sample to excite fluorescence. Feedback-controlled deformation of the mirror surface modifies the laser wavefront in such a way that sample-induced aberrations are compensated and an optimal, diffraction-limited focus is generated in the sample.

In the future, this should enable measurements of molecular dynamics not only in living cells or tissue, but also in the context of industrial high-throughput screening.



◀ Prinzip der Aberrationskorrektur und Anwendung auf FCS. (a) Ein verformbarer Spiegel im Strahlengang kompensiert die probeninduzierten Aberrationen, so dass die Wellenfront in der Probe nicht gestört ist und ein optimaler Fokus entsteht. (b) Aus FCS-Messungen ermittelte Fluorophoranzahl im Fokus ohne (blau) und mit (rot) Aberrationskorrektur für einen Brechungsindexübergang von Öl zu Wasser. Principle of aberration correction and application to FCS. (a) A deformable mirror in the beam path compensates sample-induced aberrations so that the wave front in the sample is not distorted and the optimal focus is generated. (b) Number of fluorophores in the focus determined from FCS measurements without (blue) and with (red) aberration correction for a refractive index transition from oil to water.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Tiefes neuronales Netzwerk für die Vorhersage der Zellgängigkeit von Fluoreszenzsonden

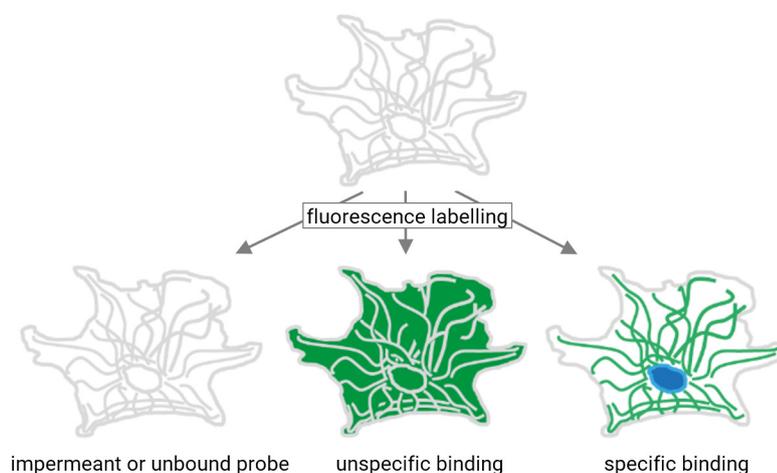
Die jüngsten Fortschritte in der supraauflösenden Fluoreszenzmikroskopie erlauben es, biologische Proben mit einer Auflösung von bis zu wenigen Nanometern abzubilden. Die direkte Visualisierung von intrazellulären Strukturen in vivo und in vitro bei dieser hohen Auflösung erfordert den Einsatz von Fluoreszenzsonden mit exzellenter Zellpermeabilität und hoher Spezifität.

Die Identifizierung zellpermeabler Sonden innerhalb einer großen Menge verfügbarer regulärer Fluorophore basiert heutzutage immer noch auf einem Trial-and-Error-Prinzip, bei dem Hunderte von Verbindungen gescreent werden. Hochdurchsatz-Synthesepattformen können diesen Prozess beschleunigen, sind aber vergleichsweise ineffektiv und kostenintensiv. Ein präzises computergestütztes Modell, das die Vorhersage der Zellpermeabilität auf Grundlage der chemischen Struktur ermöglicht, wäre daher ein unschätzbare Vorteil für die Entwicklung neuer Fluoreszenzsonden. Leider sind die derzeitigen Modelle, die auf mehreren molekularen Deskriptoren basieren, für diese Aufgabe nicht gut geeignet, da sie nur eine moderate Vorhersagegenauigkeit aufweisen.

Deep neural network for predicting the cell permeability of fluorescent probes

The recent advances in superresolution fluorescence microscopy enable biological samples to be imaged with a resolution down to few nanometers. The direct visualization of intracellular targets in vivo and in vitro at this unprecedented resolution requires the use of fluorescent probes with excellent cell permeability and high specificity.

Identification of cell-permeable probes within a large set of available regular fluorophores is still based on a trial-and-error approach that involves screening hundreds of compounds. High-throughput-screening synthesis platforms can speed up this process but are rather tedious and costly. An accurate computer-based model that enables the prediction of the cell permeability based on the chemical structure would therefore be an invaluable asset for the development of new fluorescent probes. Unfortunately, current models that are based on multiple molecular descriptors are not well suited for this task as they exhibit only a moderate prediction accuracy.



- ◀ Die Färbung von lebenden Zellen mit Fluoreszenzsonden ist nicht erfolgreich, wenn die Fluoreszenzsonden die Zellmembran nicht durchdringen können oder wenn sie nur unspezifisch binden. Nur zellpermeable Fluoreszenzsonden, die eine spezifische Bindung aufweisen, führen zu einer guten Färbung. Labeling of living cells with fluorescent probes fails if fluorescent probes are impermeant or exhibit unspecific binding. Only cell-permeable fluorescent probes that exhibit specific binding result in good staining.

Optische Nanoskopie

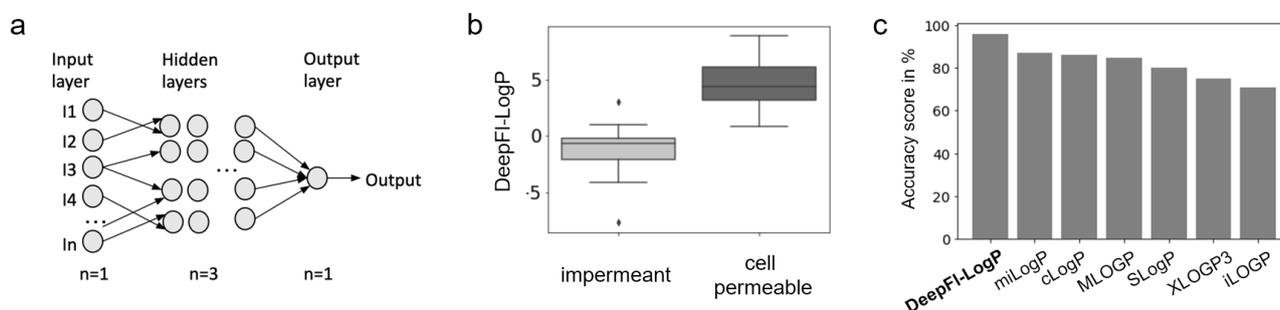
Optical Nanoscopy

Der aussagekräftigste Indikator für die Zellpermeabilität ist der sogenannte LogP-Wert, der ein Maß für die Fettlöslichkeit einer Substanz ist. Es wurde bereits gezeigt, dass zellpermeable Fluoreszenzmoleküle dazu neigen, LogP-Werte größer oder gleich 1 aufzuweisen. Es wurde bisher jedoch noch nicht quantitativ untersucht, ob der LogP-Wert allein zur genauen Kategorisierung der Permeabilität dieser Molekülklasse verwendet werden kann.

In Zusammenarbeit mit der Abberior GmbH haben wir in einem vom BMWi geförderten Projekt den neuartigen Deskriptor DeepFL-LogP entwickelt. Der dazugehörige Algorithmus basiert auf einem tiefen neuronalen Netzwerk das mit über 300 molekularen Merkmalen trainiert wurde. Dieser neue Deskriptor zeigt eine exzellente Korrelation mit den experimentellen Referenzdaten für arzneimittelähnliche Substanzen. Im Vergleich mit mehreren LogP-Deskriptoren auf dem Stand der Technik zeigte unser Deskriptor eine verbesserte Genauigkeit bei der Kategorisierung der Permeabilität von strukturell unterschiedlichen Fluoreszenzsonden. Insbesondere lässt sich mit ihm durch einfache Schwellwertbildung die Zellgängigkeit von Fluoreszenzsonden mit 96 % Genauigkeit klassifizieren. Wir erwarteten, dass dieser Deskriptor den Entwicklungsprozess für neue zellpermeable Fluorophore zukünftig weitgehend vereinfachen und beschleunigen wird.

When it comes to cell permeability, the LogP descriptor, which is a measure for the lipophilicity of a compound, is the most significant indicator. It has already been shown that cell-permeable fluorescent molecules tend to exhibit LogP values greater or equal to 1. However, it has not been quantitatively tested whether the LogP descriptor could be solely used to accurately categorize the permeability of this molecule class.

Within the scope of a project funded by the BMWi and in collaboration with Abberior GmbH, we developed the novel lipophilicity descriptor DeepFL-LogP. The underlying algorithm is based on a deep neural network that was trained with over 300 molecular features. This new descriptor exhibits excellent correlation with experimental reference data of drug-like substances. In comparison to several state-of-the-art LogP descriptors, our descriptor showed improved accuracy in categorizing the permeability of structurally diverse fluorescent probes. In particular, it can be used to classify the cell permeability of fluorescent molecules with 96 % accuracy on the basis of a simple thresholding method. Thus, we expect our descriptor to largely simplify and speed up the development of novel cell-permeable fluorophores.



Neuartiger Deskriptor für die Zellgängigkeit von Fluoreszenzsonden auf Basis eines tiefen neuronalen Netzwerks. a) Diagramm der Architektur des tiefen neuronalen Netzwerks. b) Der durchschnittliche DeepFL-LogP-Wert ist für nichtzellgängige Sonden deutlich niedriger als für zellgängige. c) Der DeepFL-LogP-Deskriptor kategorisiert Sonden mit höherer Genauigkeit als andere Standard-LogP-Deskriptoren. Novel descriptor for the cell permeability of fluorescent probes on the basis of a deep neural network. a) Diagram of the deep neural network architecture. b) The average DeepFL-LogP value is significantly smaller for cell-impermeable probes than for cell-permeable probes. c) The DeepFL-LogP descriptor correctly categorizes probes with higher accuracy than other state-of-the-art descriptors.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Bildgebung lebender Zellen durch Biolumineszenz

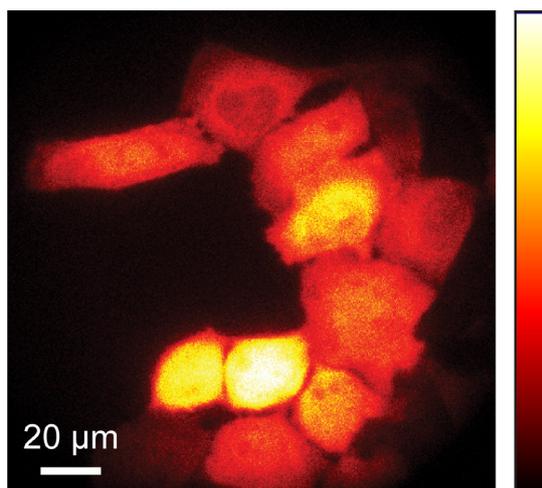
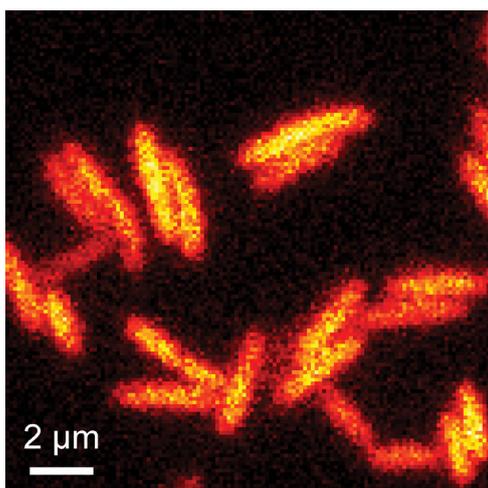
Biolumineszenz ist die biochemische Erzeugung von Licht in lebenden Zellen. Dieser Vorgang findet in der Natur in einer Vielzahl verschiedener Lebewesen wie beispielsweise Glühwürmchen statt und kann auch zur Abbildung von Zellen in der Mikroskopie genutzt werden. Im Gegensatz zur Fluoreszenzmikroskopie und anderen lichtmikroskopischen Verfahren ist bei der Biolumineszenz-Bildgebung kein externes Licht erforderlich, so dass lebende Zellen auch über lange Zeiträume ohne Photobleichen und phototoxische Effekte beobachtet werden können.

Das Biolumineszenzlicht wird in den Zellen durch die Oxidation eines Substrats erzeugt, welches als Luciferin bezeichnet wird. Bei dieser Reaktion entsteht ein Produkt in einem elektronisch angeregten Zustand, das beim Übergang in den Grundzustand ein Photon, d. h. das Biolumineszenzlicht, emittiert. Für die Reaktion ist außerdem ein Enzym erforderlich, das als Luciferase bezeichnet wird. Während in der Natur das Luciferin in der Regel von den Zellen selbst produziert wird, wird es bei der Bildgebung im Labor meist von außen zugegeben.

Imaging of living cells using bioluminescence

Bioluminescence is the biochemical production of light in living cells. This process takes place in nature in a large number of different organisms, such as fireflies, and can also be used to image cells in microscopy. In contrast to fluorescence microscopy and other light microscopy techniques, no external light is required with bioluminescence imaging, and living cells can be observed even over long time periods without photobleaching and phototoxic effects.

The bioluminescence light is generated in the cells by the oxidation of a substrate called luciferin. This reaction creates a product in an electronically excited state that emits a photon that is the bioluminescence light, on transition to the ground state. An enzyme called luciferase is also required for the reaction. While in nature the luciferin is usually produced by the cells themselves, for imaging in the laboratory it is typically supplied externally.



▲
Biolumineszenz-Mikroskopiebilder einzelner Bakterien (*Escherichia coli*, links) und Säugerzellen (HeLa-Zellen, rechts), die die Enzyme des bakteriellen Biolumineszenzsystems in optimierter Form enthalten.

Bioluminescence microscopy images of single bacteria (*Escherichia coli*, left) and mammalian cells (HeLa cells, right) containing the enzymes of the bacterial bioluminescence system in an optimized form.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Dies erhöht den Aufwand bei der Probenvorbereitung und erschwert darüber hinaus die Quantifizierung des Signals bei Langzeitmessungen, da das Luciferin durch die Biolumineszenzreaktion verbraucht wird und dadurch seine Konzentration mit der Zeit abnimmt.

Durch Verwendung des Biolumineszenzsystems aus Bakterien kann die Luciferinzugabe umgangen werden. Da beim bakteriellen System alle Enzyme für die zelluläre Produktion des Luciferins bekannt sind, können diese zusammen mit der Luciferase in beliebige Zellen eingebracht und die Zellen dadurch kontinuierlich zum Leuchten gebracht werden. Wir konnten die beteiligten Enzyme des bakteriellen Biolumineszenzsystems durch verschiedene Verfahren verbessern, so dass die Lichtausbeute deutlich erhöht wurde. Dies ermöglicht die schonende Bildgebung einzelner Bakterien- und Säugerzellen mittels Biolumineszenz-Mikroskopie ohne die Zugabe externer Substrate, wodurch sich auch licht-sensitive Prozesse auf einfache Weise beobachten lassen.

This increases the effort required for sample preparation and also makes it more difficult to quantify the signal in long-term measurements, because the luciferin is consumed by the bioluminescence reaction and its concentration thus decreases over time.

By using the bioluminescence system from bacteria, the addition of luciferin can be bypassed. Since all enzymes for the cellular production of the luciferin are known for the bacterial system, they can be introduced into any cells together with the luciferase, thereby causing the cells to emit light continuously. We improved the enzymes involved in the bacterial bioluminescence system by various methods so that the light yield was significantly increased. This enables the gentle imaging of individual bacterial and mammalian cells by means of bioluminescence microscopy without the addition of external substrates, whereby light-sensitive processes can also be easily observed.



Bakterien (*E. coli*) mit dem verbesserten bakteriellen Biolumineszenzsystem *ilux*. Das Biolumineszenzlicht von mit den Bakterien bewachsenen Agarplatten ist im Dunkeln mit dem bloßen Auge gut sichtbar.

Bacteria (*E. coli*) containing the improved bacterial bioluminescence system *ilux*. The bioluminescence light from the bacteria grown on agar plates is clearly visible to the naked eye in the dark.

Optische Nanoskopie

Optical Nanoscopy

Reflexionsnanoskopie an opaken Proben mittels Absorptionsmodulation

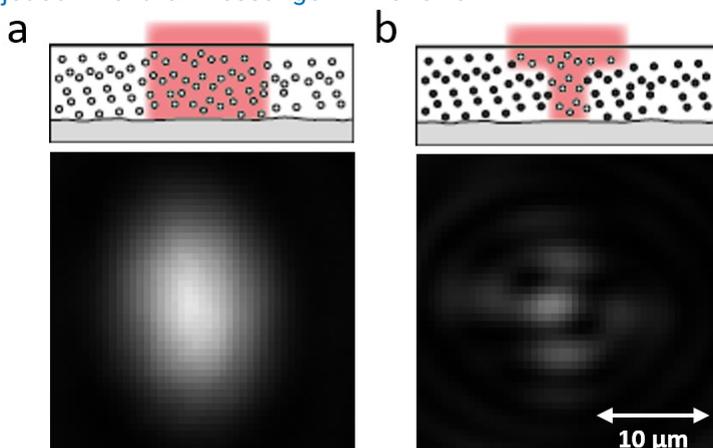
In vielen Gebieten der Materialwissenschaften ist die Bestimmung relevanter Kenngrößen von technischen Werkstoffen von zentraler Bedeutung. In der Regel werden in der Materialographie hierfür optische Reflexionsmikroskope eingesetzt, da diese einen geringen Aufwand bei der Probenpräparation erfordern und kostengünstig sind. Aufgrund der durch Beugung begrenzten Auflösung dieser Mikroskope muss jedoch bei modernen Materialien mit ihren Korngrößen von deutlich unter einem Mikrometer auf aufwendigere Mikroskopiemethoden, wie z. B. Rasterelektronenmikroskopie, zurückgegriffen werden.

Um die Auflösung der optischen Mikroskope bei Werkstoffuntersuchungen zu steigern, kann das STED-Prinzip nicht direkt angewendet werden, da die Werkstoffstruktur auf der Oberfläche nicht mit Farbstoffen markiert werden kann und daher andere Kontrastverfahren wie beispielsweise Reflexion, Polarisation oder Interferenz zum Einsatz kommen. Aus der optischen Lithographie ist jedoch bekannt, dass mit Hilfe von photochromen Dünnschichten, die unter Bestrahlung ihre Absorptionseigenschaften reversibel ändern, eine Auflösungsverbesserung erreicht werden kann. Diese wurde bereits für die Transmissionsmikroskopie experimentell bestätigt, jedoch nicht für Messungen in Reflexion.

Reflection nanoscopy of opaque samples using absorbance modulation

In many areas of materials science, the quantification of relevant parameters of technical materials is of central importance. Reflection optical microscopy is usually used for this purpose, since it requires little effort for sample preparation and is cost-effective. However, due to the diffraction-limited resolution of optical microscopes, more demanding methods, such as scanning electron microscopy, have to be used for modern materials with grain sizes well below one micrometer.

In order to improve the resolution of optical microscopes for material analysis, the STED principle cannot be directly applied because the material structure on the surface cannot be labeled with fluorescent markers and therefore other contrast methods such as reflection, polarization, or interference are used. However, it is known from optical lithography that an increase in resolution can be achieved with the aid of photochromic thin films that reversibly change their absorption properties under irradiation. This has already been experimentally confirmed for transmission microscopy but not for measurements in reflection.



- ◀ (a) Visualisierter Laserspot auf einem Spiegel unterhalb einer transparenten AML, wobei für die Beleuchtung die Apertur des Objektivs nicht voll ausgenutzt wurde. (b) Wird die AML im äußeren Bereich des Laserspots intransparent geschaltet, so wird nur der Teil des Laserspots vom Spiegel reflektiert, welcher sich innerhalb der Nanoapertur befindet. (Daten: C. Rembe, IEI, Clausthal)
- (a) Visualized laser spot on a mirror below a transparent AML where the aperture of the objective has not been fully utilized for illumination. (b) If the AML is switched to no longer be transparent in the outer region of the laser spot, only the part of the laser spot that is inside the nanoaperture is reflected by the mirror. (Data: C. Rembe, IEI, Clausthal).

Optische Nanoskopie

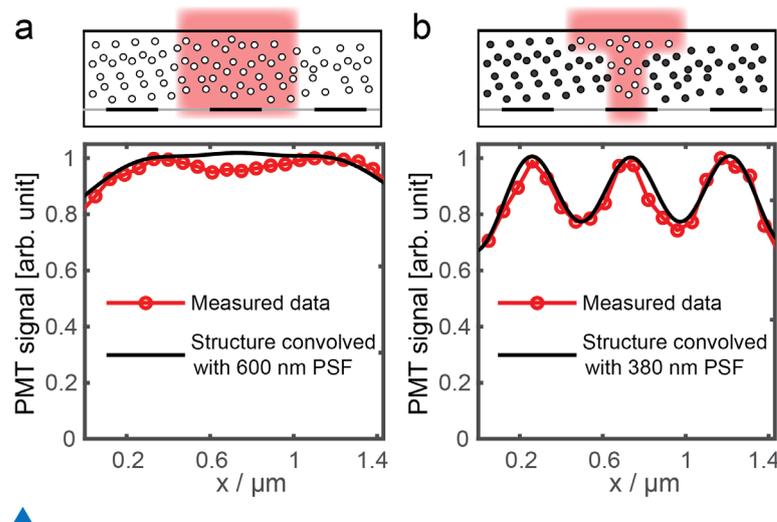
Optical Nanoscopy

Im Rahmen des DFG-geförderten Verbundprojekts NanoVidere arbeiteten wir zusammen mit unseren Kooperationspartnern von der TU Clausthal an der experimentellen Realisierung dieses Konzepts für Messungen in Reflexion und vereinten dazu Expertisen aus den Bereichen organische Chemie, physikalische Chemie, Materialtechnik, Optik und Mikroskopie.

Wir konnten unseres Wissens nach zum ersten Mal nachweisen, dass die Beugungsgrenze in der optischen Reflexionsmikroskopie mit Hilfe des Prinzips der Absorptionsmodulation umgangen werden kann. Dazu wurden reversible Blenden in eine photochrome Schicht (AML, absorbance modulation layer), die auf die Messoberfläche aufgebracht wurde, eingeschrieben und hierdurch der reflektierende Bereich der Messoberfläche räumlich eingengt. Die Resultate der im Verbund mit den weiteren NanoVidere-Partnern durchgeführten Arbeiten zeigen, dass flächige Reflexionsmessungen bei mindestens fünf-fach verbesserter Auflösung und Bildaufnahmezeiten, die in der gleichen Größenordnung wie bei der Fluoreszenznanoskopie liegen, zukünftig möglich sein sollten.

Within the framework of a DFG-funded joint project, we worked on the experimental realization of this concept for measurements in reflection in cooperation with our partners from the TU Clausthal, combining expertise from the fields of organic chemistry, physical chemistry, materials technology, optics, and microscopy.

To our knowledge, we have demonstrated for the first time that the diffraction limit in optical reflection microscopy can be circumvented using the principle of absorbance modulation. For this purpose, reversible apertures were generated in a photochromic layer (AML, absorbance modulation layer) with which the measurement surface has been coated, thereby spatially constricting the reflecting region of the measurement surface. The results of the work carried out in collaboration with the other partners show that two-dimensional reflection measurements with at least a five-fold improvement in resolution and image acquisition times of the same order of magnitude as in fluorescence nanoscopy should be possible in the future.



Reflexionsnanoskopie einer Gitterstruktur mit einem Linienabstand von 500 nm bei einer numerischen Apertur von 0,65. (a, b) Linienscan (a) ohne und (b) mit Nanoblende. Für eine Punktbildfunktion (PSF) mit (a) 600 nm und (b) 380 nm Halbwertsbreite ohne und mit Nanoblende können die gemessenen Linienprofile (rot) gut angenähert werden (schwarz).

Reflection nanoscopy of a grid structure with line spacing of 500 nm using a numerical aperture of 0.65. (a, b) Line scan (a) without and (b) with nanoaperture. For a point spread function (PSF) with (a) 600 nm and (b) 380 nm full width at half maximum without and with nanoaperture, the measured line profiles (red) can be well approximated (black).

Berichte aus der Abteilung Departmental Reports



Dr. Peter Simon
Abteilungsleiter

T +49 551/5035-21
F +49 551/5035-99
M peter.simon@ifnano.de

Dr. Jürgen Ihlemann
Ansprechpartner für
Nanostrukturtechnologie

T +49 551/5035-44
F +49 551/5035-99
M juergen.ihlemann@ifnano.de



MITARBEITENDE / STAFF MEMBERS

Dr. Andreas Blumenstein

Dr. Clemens Beckmann

Dr. Jörg Meinertz

Laura Fütterer

Frederick Kleinwort

Jan-Hendrik Klein-Wiele

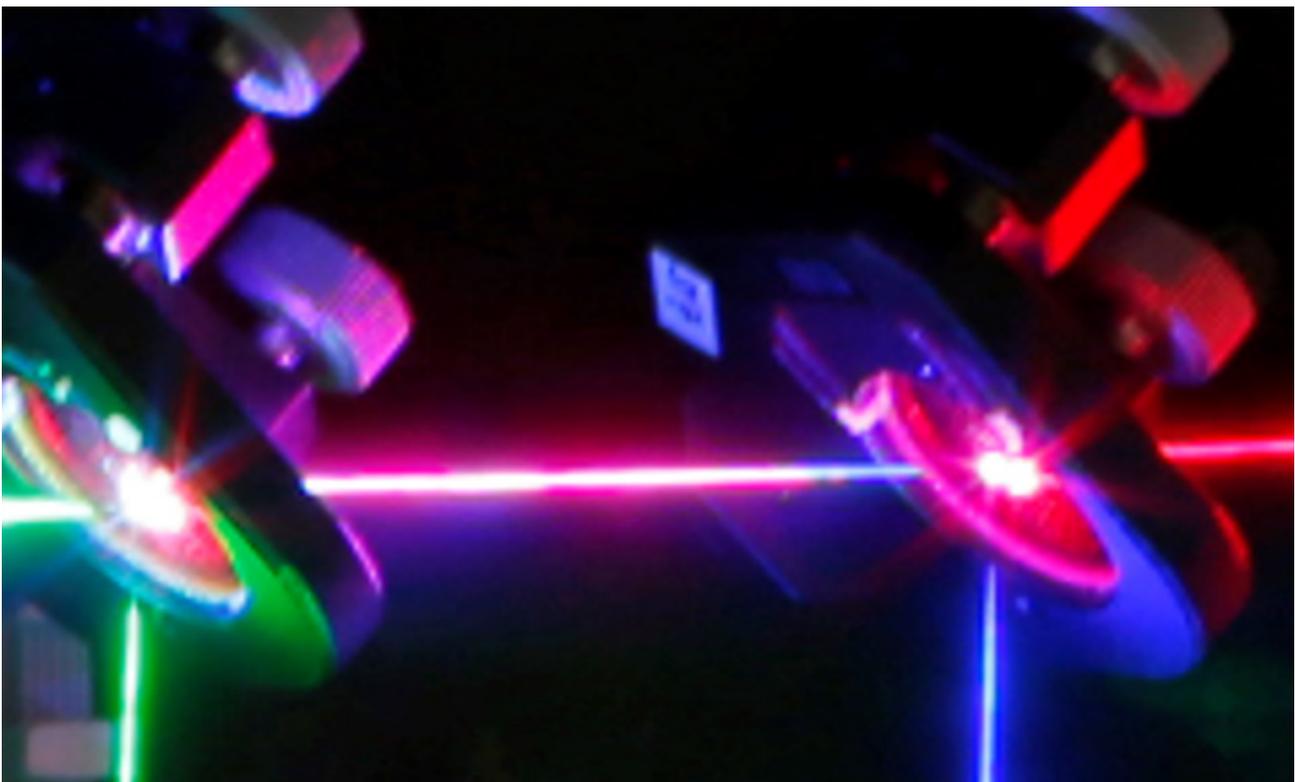
Jens Oltmanns

Lukas Janos Richter

Andreas Röben

Till Schröder

Hendrik Wrigge



Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Mikro- und nanostrukturierte Oberflächen verfügen über besondere Funktionalitäten, die vielfältige Einsatzmöglichkeiten in mikrofluidischen, tribologischen, medizintechnischen oder optischen Anwendungen bieten. Laserablation und Lasermodifikation sind Schlüsseltechnologien zur Erzeugung der dafür notwendigen Strukturen und haben den besonderen Vorteil, die Oberflächenfunktionalisierung mit einem berührungslosen Verfahren zu bewerkstelligen. Mit angepassten Bestrahlungsstrategien, unter Ausnutzung von Maskenprojektion oder interferenzbasierter Strahlmanipulation, wird bei geeigneter Laserwellenlänge und Pulsdauer Sub- μm -Präzision routinemäßig erreicht. Dabei gewinnt der Einsatz ultrakurzer Pulse im Piko- und Femtosekundenbereich in immer mehr Anwendungsgebieten zunehmend an Bedeutung. Für die Qualitäts- und Effizienzsteigerung in bestehenden und für die Erschließung neuer Anwendungen ist die ständige Weiterentwicklung ultrakurz-pulsbasierter Techniken unabdingbar. Dabei stehen der Einsatz leistungsstarker ultrakurzer Pulse sowie die Herstellung von periodischen Nanostrukturen auf technischen Oberflächen im Mittelpunkt.

Aktuelle Themen sind die Untersuchung der Entstehung periodischer Oberflächenstrukturen nach Ultrakurz-puls-Laserbestrahlung, die zeitaufgelöste Messung der Reflektivität von Metallen und Halbleitern, die diffraktive Laserbeschriftung von 3D-Freiformflächen, die Entwicklung von Methoden zur Erzeugung hochauflösender individualisierbarer computergenerierter Hologramme und die Erzeugung periodischer Nanostrukturen mit großem Aspektverhältnis. Weitere Arbeiten befassen sich mit der Erzeugung und Anordnung von plasmonischen Nanopartikeln und Silizium-Nanokristallen. Darüber hinaus wird die laserbasierte Formgebung und Formkorrektur von Glassubstraten für optische Anwendungen untersucht.

Micro- and nanostructured surfaces provide special functionalities that give rise to numerous applications in various fields like photonics, fluidics, tribology, and medicine. Laser ablation and surface modification are key enabling technologies for the generation of such surface structures, and based on their noncontact character, they provide a flexible and economic processing capability. With appropriate beam delivery concepts like mask projection and interference methods, submicron precision is routinely achieved if the laser wavelength and the pulse duration are suitably chosen.

In this field, ultrashort laser pulses are rapidly gaining in importance for a range of emerging applications. For a sustainable growth of this technology field, it is essential to further develop various shortpulse-based techniques. This is one of the main objectives of our department. A special emphasis is put on the utilization of high-power ultrashort pulses and the fabrication of periodic nanostructures on technical surfaces.

Current topics include the investigation of the formation of periodic surface structures after ultrashort-pulse laser irradiation, time-resolved reflectivity measurements on metals and semiconductors, the diffractive marking of 3D free-form surfaces, the development of laser-processing techniques for the fabrication of computer-generated holograms, and the generation of periodic nanostructures with large aspect ratios. Additional research is focused on the generation and arrangement of plasmonic nanoparticles and silicon nanocrystals. Further laser-based forming and correction of glass substrates for optical applications is also being investigated.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Untersuchung der Entstehung periodischer Oberflächenstrukturen nach Ultrakurzpuls-Laserbestrahlung

In Zusammenarbeit mit Theorie-Arbeitsgruppen der Universität Kassel und der TU Kaiserslautern untersuchen wir die Entstehungsmechanismen und Eigenschaften von laserinduzierten periodischen Oberflächenstrukturen (engl. LIPSS). Derartige Strukturen könnten in vielen Bereichen der Industrie eingesetzt werden, um die Eigenschaften von Oberflächen zu verändern. Allerdings ist der zugrundeliegende Mechanismus nach wie vor nicht abschließend geklärt. Gemäß einer weitverbreiteten Theorie wird die Entstehung von LIPSS durch die Interferenz des eingestrahnten Laserlichts mit einer sich auf der Probenoberfläche ausbreitenden Plasmonenwelle (engl. SPP) erklärt. Um SPP anzuregen, muss die Oberfläche rau sein oder anderweitige Defekte besitzen.

Investigation of the formation of periodic surface structures following ultrashort-pulse laser irradiation

We are investigating the mechanisms responsible for the formation of laser-induced periodic surface structures (LIPSS) and their properties. The work is being done in cooperation with theory workgroups of the University of Kassel and TU Kaiserslautern. The structures could be used in many industrial branches to modify the properties of surfaces (functional surfaces). Nevertheless, the underlying processes are still not fully understood. Following a well-accepted theory, the formation of LIPSS can be explained by interference of light and a plasmonic surface wave called surface plasmon polaritons (SPP). In order to generate SPP, a rough surface or a surface containing other defects is required.

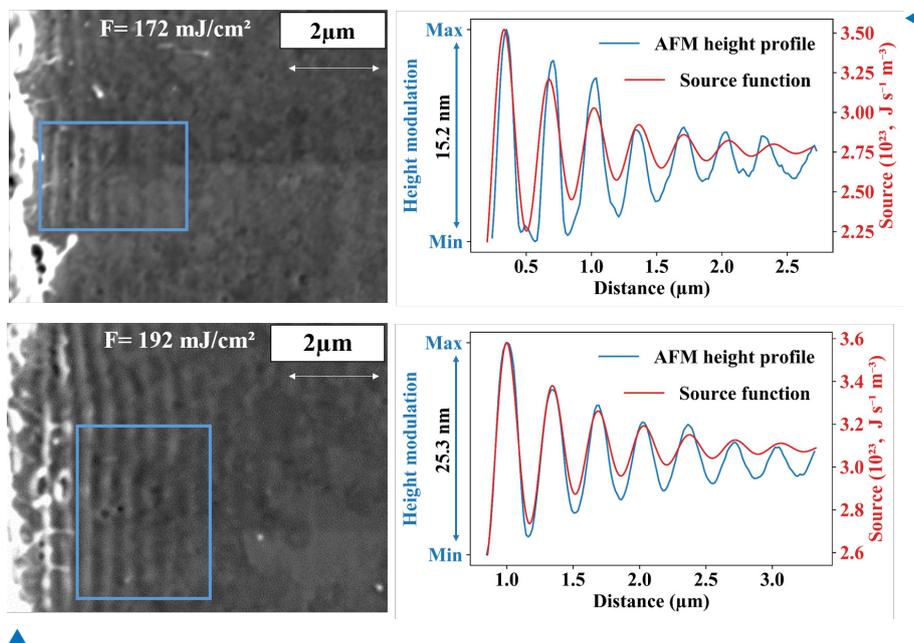


Abbildung 1: Die Abbildung zeigt links Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen der entstandenen LIPSS nach Bestrahlung mit einem ultrakurzen Laserpuls bei 343 nm und einer Fluenz von 172 mJ/cm² (oben) und 192 mJ/cm² (unten). Die blauen Vierecke zeigen den Bereich, in dem die rechts in Blau gezeigten Höhenprofile bestimmt wurden. In Rot im gleichen Graph ist die theoretisch errechnete Verteilung des Energieeintrags in die Probe zu sehen. Die Grundlage der theoretischen Berechnungen ist eine Interferenz aus Oberflächenplasmonen und der Lichtwelle.

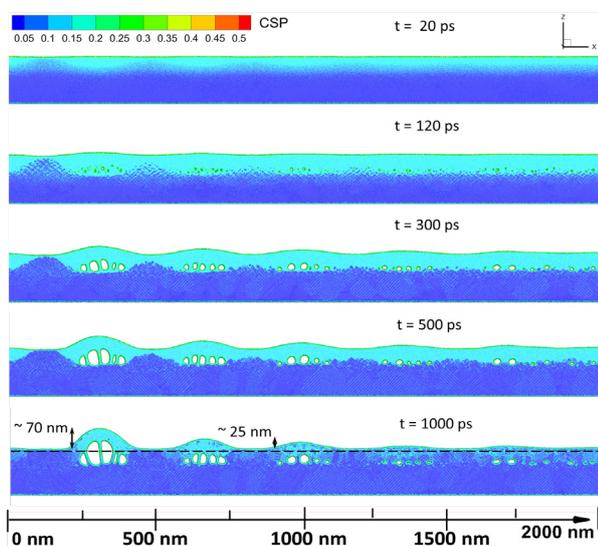
Figure 1: The figure shows scanning electron microscope pictures of the formed LIPSS after irradiation with a single ultrashort laser pulse with a wavelength of 343 nm and a fluence of 172 mJ/cm² (top) and 192 mJ/cm² (bottom). The blue squares indicate the regions where the height measurements were taken and are displayed on the right. The red curves show the calculated distribution of energy, assuming an interference of surface plasmon polaritons and the laser pulse.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Zum Testen der Theorie haben wir eine Goldprobe durch einen Kratzer vorbehandelt und anschließend mit einem einzelnen ultrakurzen Laserpuls bestrahlt. Die entstehenden LIPSS sind im linken Teil von Abbildung 1 zu sehen. Für die Bestrahlung wurde eine kurze Wellenlänge von 343 nm verwendet, da in diesem Fall der für SPP charakteristische exponentielle Abfall in der Intensität am stärksten und damit am besten zu beobachten ist. Im rechten Teil von Abbildung 1 ist das Höhenprofil der Strukturen mit dem nach der Plasmentheorie erwarteten Energieeintrag abgebildet. Es ist eine gute Übereinstimmung zwischen den beiden Kurven bezüglich Periode und Abklingverhalten zu erkennen.

Auf Grundlage des Energieeintrags aus den Berechnungen bei 130 mJ/cm^2 wurden Simulationen basierend auf dem Molekular-Dynamik-Zwei-Temperatur-Modell (engl. MD-TTM) durchgeführt. Eine Zeitentwicklung der Simulation ist in Abbildung 2 zu sehen. Das dargestellte Simulationsvolumen beträgt $4000 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$ in Richtung x, y und z Richtung und besteht aus 375 Millionen Atomen. In der Simulation ist zu erkennen, dass die Strukturen durch Aufwölbung der Goldoberfläche entstehen, verursacht durch die Entstehung von Hohlräumen unter der Oberfläche..



To test this theory, we irradiated a gold sample with a preexisting scratch with a single ultrashort laser pulse. The forming LIPSS are displayed in the left part of Figure 1. For the irradiation, we used light with a wavelength of 343 nm, since for short wavelength the exponential decay of the intensity is the strongest. This kind of decay is characteristic for SPP. The right part of Figure 1 shows the measured height profile of the structures together with the predicted energy input assuming an interference of light and SPP. Both curves show good agreement with regard to the period of the oscillations and decay of height.

Based on the calculated energy input for 130 mJ/cm^2 , we performed simulations using a molecular-dynamic two-temperature-model (MD-TTM) framework. A time evolution of the simulation can be seen in Figure 2. The volume of the displayed simulation is $4000 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 200 \text{ nm}$ in x, y, and z-direction, respectively, and contains about 375 million atoms. The simulation shows that the structures are formed by the uplift of the gold surface, caused by void forming underneath the surface.

◀ Abbildung 2: Die Abbildung zeigt atomare Momentaufnahmen zu verschiedenen Zeiten nach Bestrahlung mit einem 250 fs langen Laserpuls bei 343 nm mit einer Fluenz von 130 mJ/cm^2 . Nach 20 ps zeigt die Oberfläche ein periodisches Aufschmelzen. Bei 120 ps entstehen Hohlräume unterhalb der Oberfläche, welche anschließend expandieren. Nach 1000 ps beginnt die Oberfläche zu erstarren. Dabei ist für das erste Maximum eine Höhe von 70 nm erkennbar, für das dritte eine Höhe von 25 nm. Die Atome sind farblich nach ihrem Central Symmetry Parameter (CSP) eingefärbt, (kristallin < 0.08 < Defekte < 0.11 < flüssig < 0.25 < Oberflächen < 0.50 < gasförmig). Figure 2: The figure shows atomic snapshots of the time evolution of a gold surface after irradiation with a 250 fs long laser pulse with a fluence of 130 mJ/cm^2 at 343 nm. At 20 ps after laser irradiation, the sample surface starts melting in a periodic manner. At 120 ps voids start forming underneath the surface that increase in size until at the 1000 ps the liquid gold starts resolidifying. Finally, the first peak has a height of about 70 nm and the third peak a height of about 25 nm. The atoms are colored according to the central symmetry parameter (CSP), (crystal < 0.08 < defects < 0.11 < liquid < 0.25 < surfaces < 0.50 < vapor).

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Pump-Probe-Aufbau zur breitbandigen, zeitaufgelösten Messung der Reflektivität von Metallen und Halbleitern

Ziel unseres Vorhabens ist es, die Änderung der Eigenschaften einer Materialoberfläche während und nach einer Anregung mit ultrakurzen Pulsen zu untersuchen, um ein grundlegendes Verständnis der Verhaltensweise bei optischer Anregung zu gewinnen. Dies ist beispielsweise für die Entwicklung von Methoden zur Oberflächenfunktionalisierung besonders wichtig.

Dazu wird ein Pump-Probe-Aufbau entwickelt (Abbildung 1), mit welchem bei einer hohen zeitlichen und spektralen Auflösung die Änderung der Oberflächenreflektivität gemessen werden kann. Ziel ist hierbei ein durchgehendes Verständnis über den Einfluss von ultrakurzen Femtosekundenpulsen auf ein Material zu erlangen sowie Informationen über den gesamten Prozess bis hin zur Ablation des Materials zu erhalten.

Die Anregung der Probe erfolgt durch einen Pumpuls mit variierbarer Dauer, minimal 80 fs. Mit Hilfe eines kaskadierten Hohlfaseraufbaus kann ein Probepuls mit einer Bandbreite von 480 nm bis 1000 nm realisiert werden, der mit Hilfe eines Spiegelkompressors auf 15 fs komprimiert wird. Eine Besonderheit ist dabei ein verhältnismäßig schwach moduliertes Spektrum. Um eine maximale zeitliche Auflösung zu gewährleisten, werden Pump- und Probepuls koaxial auf die Probe geleitet. Das von der Probe reflektierte Probepuls-Signal wird von den reflektierten Anteilen des Pumpulses getrennt und mit einem Spektrometer gemessen. Der Vergleich mit einem Referenzspektrum ermöglicht dann die Ermittlung der geänderten Reflektivität zum Zeitpunkt des Auftreffens des Probepulses auf der Probe.

Broadband pump-probe setup for time-resolved reflectivity measurement on metals and semiconductors

We investigated the physical processes involved in the laser processing of surfaces in order to gain a basic understanding of the material's changes upon optical excitation. This is particularly important for the development of methods for surface functionalization.

Therefore, to investigate the transient optical properties of material surfaces during and after excitation, a pump-probe setup was developed (Figure 1) that allows measurement of the reflectivity change with high temporal and spectral resolution. The aim is to understand the influence of ultrashort femtosecond pulses on materials, as well as to obtain information about the entire process up to the ablation of the material.

The sample is excited by a pump pulse of variable duration with a minimum of 80 fs. Using a cascaded hollow-fiber setup, a probe pulse with a bandwidth of 480 nm - 1000 nm can be generated, which is compressed down to 15 fs using a dispersive mirror compressor. A special feature is a relatively weakly modulated spectrum. To ensure maximum temporal resolution, the pump and probe pulses are directed coaxially onto the sample. The probe pulse signal reflected by the sample is separated from the reflected components of the pump pulse and measured with a spectrometer. Comparison with a reference spectrum then allows for the determination of the changed reflectivity at the time the probe pulse hits the sample.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Durch Veränderung der optischen Wegstrecke des Pumpimpulses wird erreicht, dass Pump- und Probestimpulse relativ zueinander zu unterschiedlichen Zeiten auf die Probe treffen. Durch mehrere Messungen kann so eine Zeitabtastung der momentanen Reflektivität während und nach dem Anregungsprozess realisiert werden.

By changing the optical path of the pump pulse, the pump and probe pulses are delayed relative to each other. A time sampling of the instantaneous reflectivity during and after the excitation process can thus be realized.

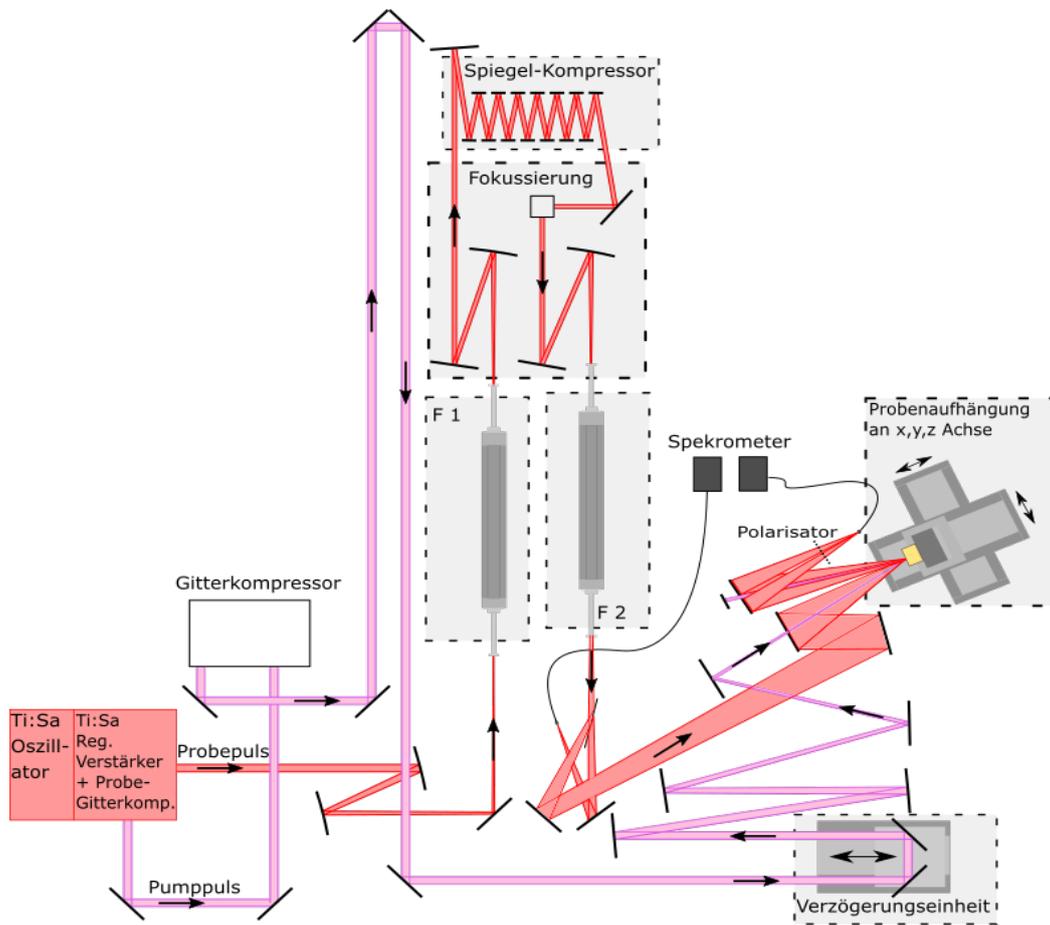


Abbildung 1: Übersicht über den experimentellen Aufbau. Der Probestimpuls (rot) wird über verschiedene Stufen spektral verbreitert und komprimiert. Der spektralen Verbreiterung dienen die gasgefüllten Hohlfasern F1 und F2. Der Pumpimpuls ist in Lila dargestellt. Pump- und Probestimpuls werden koaxial auf die Probe geleitet. Das von der Probe reflektierte Messsignal wird von Pumpimpulsanteilen bereinigt und mit einem Spektrometer gemessen. Aus dem Vergleich des Ergebnisses mit einer separat gemessenen Referenz (zweiter Probestrahlengang) kann dann die Reflektivitätsänderung bestimmt werden. Das zeitliche Abtasten des Anregungszustandes wird über eine einstellbare Wegstrecke des Pumpimpulses realisiert.

Figure 1: Overview of the experimental setup. The probe pulse (red) is spectrally broadened and compressed via different stages. The gas-filled hollow fibers F1 and F2 are used for spectral broadening. The pump pulse is shown in purple. Pump and probe pulses are directed coaxially onto the sample. The measurement signal reflected by the sample is recorded by a spectrometer. By comparing the result with a separately measured reference (second probe beam path), the reflectivity change can then be determined. The temporal sampling of the excitation state is realized via an adjustable path length of the pump pulse.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Diffraktive Laserbeschriftung von 3D-Freiformen

Die diffraktive Markierung von Oberflächen ermöglicht Fälschungsschutz, individuelle Designmöglichkeiten sowie biologisch-chemische Funktionalisierungen und ist eine der Expertisen am IFNANO. Für die großflächige Markierung wird dabei seit vielen Jahren erfolgreich ein am IFNANO entwickeltes Gitterinterferometer eingesetzt, welches in Kombination mit einem kommerziellen Laser-Scanner schnelle und hochpräzise Beschriftungen von Oberflächen ermöglicht. Bislang kann diese Methode jedoch nur auf ebenen Flächen verlässlich angewandt werden, da die Beschriftungstechnik eine feste Bearbeitungsebene hat. Gekrümmte Flächen müssen aufwendig nachgeführt und stückweise beschrieben werden, was Zeit kostet und Fehler in der ansonsten strikten Periodizität mit sich bringt. Um zukünftig auch 3D-Freiformen mit der gleichen Präzision und vergleichbarer Geschwindigkeit bearbeiten zu können, wurde das vom BMWi geförderte ZIM-Projekt „Z-shifter zur diffraktiven Beschriftung gekrümmter Werkstoffflächen“ ins Leben gerufen. Zusammen mit unserem Projektpartner deineMaschine GmbH entwickeln wir ein System, mit dem die bislang feste Beschriftungsebene schnell verfahren werden kann. Dabei soll die Präzision der Mikrostrukturierung erhalten bleiben, die periodischen Gitterlinien über die 3D-Fläche hinweg also phasentreu fortgesetzt werden.

Diffractive laser marking of 3D free forms

The diffractive marking of surfaces enables counterfeit protection, individual design possibilities, as well as biological-chemical functionalization and is one of the areas of expertise at the IFNANO. For many years, a grating interferometer developed at the IFNANO has been successfully used for large-area markings, which, in combination with a commercial laser scanner, enables the fast and highly precise marking of surfaces. In this process, microstructures are written on, for example, metals or hardened steel with strictly periodic patterns and high modulation depths. However, so far this method can only be reliably applied to flat surfaces because the marking technique has a fixed processing plane. Curved surfaces have to be traced in a complex way and marked section by section, which costs time and introduces errors in the otherwise strict periodicity. In order to process 3D free forms with the same precision and comparable speed in the future, the ZIM project "Z-shifter for diffractive marking of curved material surfaces", funded by the BMWi, was launched. Together with our project partner deineMaschine GmbH, we are developing a system that allows the previously fixed marking plane to be moved quickly. The precision of the microstructuring is to be maintained, i.e. the periodic grid lines are to be continued in phase across the 3D surface.

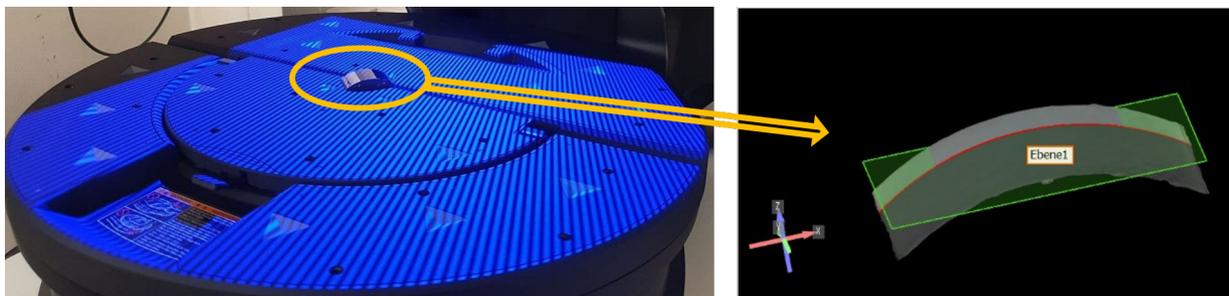


Abbildung 1: Das gekrümmte Werkstück kann mit dem optischen 3D-Koordinatenmessgerät von allen Seiten vermessen werden, so dass eine präzise Kenntnis der zu beschriftenden Oberfläche vorliegt.

Figure 1: The curved workpiece can be measured from all sides with the optical 3D coordinate measuring machine so that precise knowledge of the surface to be marked is available.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Hierfür wurde gemeinsam mit deineMaschine GmbH zunächst ein Konzept entwickelt und von deineMaschine GmbH eine entsprechende Mechanik entworfen und angefertigt. Die Integration der neuen Z-Shifter-Mechanik in den optischen Aufbau der Beschriftungsanlage erfolgt am IFNANO. Des Weiteren muss der Fokus des Lasers mit einem kommerziellen Fokus-Shifter synchron mit der Bearbeitungsebene verschoben und eine zugehörige Steuerung programmiert werden.

Für die präzise diffraktive Beschriftung von Freiformen ist es notwendig, die Oberflächen genau zu kennen. Da nicht für alle Werkstücke immer hinreichend präzise Daten vorliegen, wurde am IFNANO ein optisches 3D-Koordinatenmessgerät (VL-500 von KEYENCE) angeschafft (Abbildung 1). Für die Vermessung mit dem 3D-Scanner müssen spiegelnde Oberflächen zunächst mattiert werden. Hierzu kann ein kommerzielles Mattierungsspray genutzt werden, welches nach dem Scanvorgang weitestgehend wieder verdunstet, so dass die Oberflächen nicht aufwendig gereinigt werden müssen (Abbildung 2). Die mit dem 3D-Koordinatenmessgerät vermessenen Werkstücke sollen dann im Projekt mit dem neuen Z-Shifter beschriftet werden, der dabei auf Präzision und Geschwindigkeit optimiert wird.

For this purpose, a concept was first developed together with our partner, and a corresponding mechanical system was designed and manufactured by deineMaschine GmbH. The integration of the new Z-shifter mechanism into the optical setup of the marking system was carried out at IFNANO. Furthermore, the focus of the laser had to be shifted synchronously with the working plane using a commercial focus shifter and an associated control system had to be programmed.

For the precise diffractive marking of free forms, it is necessary to know the surfaces exactly. Since sufficiently precise data is not always available for all workpieces, an optical 3D coordinate measuring device (VL-500 from KEYENCE) was acquired by the IFNANO (Figure 1). For measurement with the 3D scanner, reflective surfaces must first be matted. A commercial matting spray that largely evaporates after the scanning process can be used for this purpose such that the surfaces do not have to be cleaned extensively (Figure 2).

The workpieces measured with the 3D coordinate measuring machine can then be marked in the project with the new Z-shifter, which will be optimized for precision and speed.



Abbildung 2: Diffraktive Strukturen (links als Designmerkmal) konnten bislang nur auf ebenen Oberflächen geschrieben werden. Mit Z-Shifter sollen auch gekrümmte Oberflächen (Mitte) beschrieben werden. Für die Erfassung mit dem 3D-Scanner werden die Werkstücke mit einem Mattierungsspray versehen (rechts).

Figure 2: Diffractive structures (on the left as a design feature) could previously only be written on flat surfaces. With Z-shifter the writing process will be possible on curved surfaces (center). For recording with the 3D scanner, the workpieces are treated with a matting spray (right).

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Weiterentwicklung der Technologie zur Erzeugung hochauflöser individualisierbarer computer-generierter Hologramme (CGH) auf Metallen durch direkte Kurzpuls-Laser-Ablation

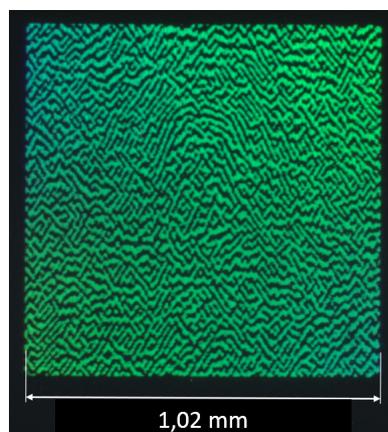
Im Zeitalter der Digitalisierung besitzen individualisierte, maschinenlesbare Produktmarkierungen eine wichtige Rolle. Neben einem zunehmend hohen Dateninhalt sollen solche Markierungen auch einen hohen Fälschungsschutz gewährleisten sowie resistent gegen teilweise Beschädigungen sein. Zudem ist es vorteilhaft, wenn das Vorhandensein der Markierung zwar erkannt, die enthaltenen Informationen aber verdeckt enthalten sind und nur mit einem geeigneten, möglichst einfachen, Lesegerät ausgelesen werden können.

Hier bieten auf der Produktoberfläche direkt geschriebene computergenerierte Hologramme (CGH) besonders gute Möglichkeiten, da sie zum einen nur schwer zu fälschen sind und zum anderen umfangreiche verdeckte Informationen enthalten können, die nur bei Beleuchtung mit einer geeigneten kohärenten Lichtquelle ausgelesen werden können. Zudem lässt sich die Information redundant auf der gesamten Fläche verteilen, wodurch solche Markierungen besonders resistent gegen teilweise Beschädigungen sind.

Further development of the technology for generating high-resolution customizable computer-generated holograms (CGH) on metals by direct short-pulse laser ablation

In the age of digitalization, customized, machine-readable product markings play an important role. In addition to storing increasingly high data volumes, such markings should also guarantee a high level of protection against counterfeiting and be resistant to partial damage. It is also advantageous if the presence of the marking can be detected, but the information it contains is concealed and can only be read with a suitable, preferably simple, reading device.

Computer-generated holograms (CGH) written directly on the product surface are particularly attractive, since they are difficult to forge and can also contain extensive hidden information that can only be read when illuminated by a suitable coherent light source.



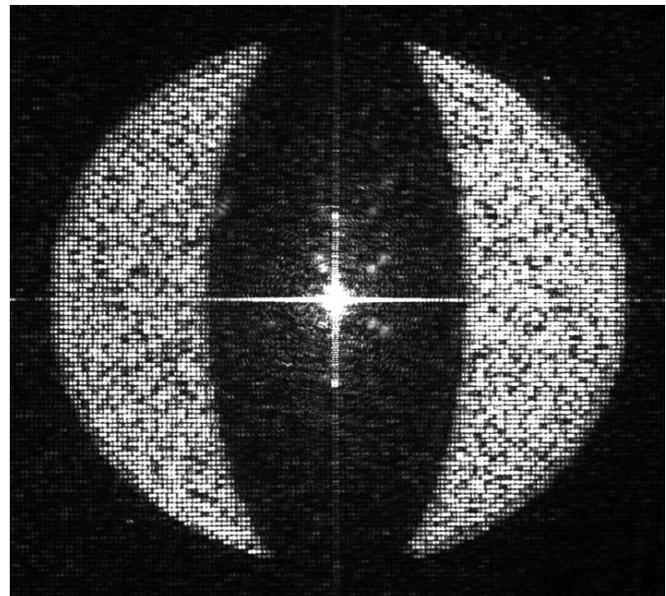
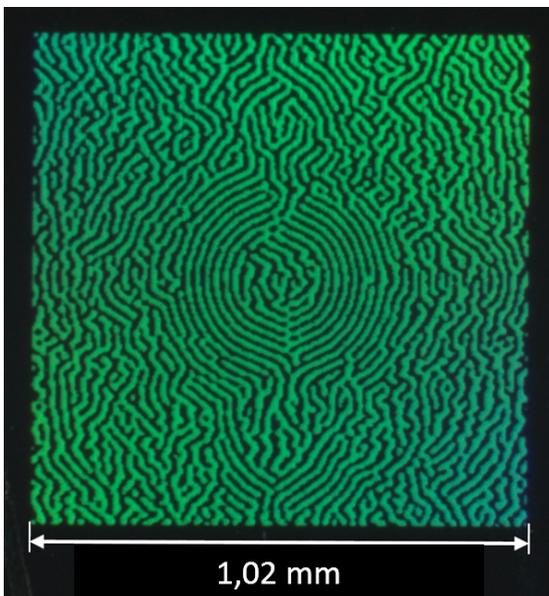
▲
Abbildung 1: Lichtmikroskop-Aufnahme eines mittels Kurzpuls-Laser-Ablation auf Edelstahl geschriebenen CGH (links) sowie der rekonstruierten Information in Form des IFNANO-Logos (rechts).
Figure 1: Light microscope image of a CGH (left) written on stainless steel by short-pulse laser ablation and the reconstructed information in the form of the IFNANO logo (right).

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Gerade in diesem Fall ist eine zuverlässige, individualisierte Markierung mit hoher Informationsdichte, hohem Kontrast und gleichzeitig geringer Schädigungstiefe durch die aktuell verwendeten klassischen Beschriftungstechnologien nicht realisierbar. Das Institut für Nanophotonik entwickelt zusammen mit der DIOPTIC GmbH eine entsprechende Schreibtechnologie sowie das dazugehörige kompakte Lesegerät mit dem Ziel einer erfolgreichen Markteinführung dieser Technologie innerhalb der nächsten zwei Jahre. Angesichts des immensen Marktvolumens bestehen in dieser Hinsicht sehr gute Erfolgsaussichten. Die Abbildungen 1 und 2 zeigen Beispiele solcher Markierungen, die mit einem Kurzpulslaser direkt auf Edelstahl geschrieben wurden, sowie die Rekonstruktionen der jeweils enthaltenen Information.

In addition, the information can be distributed redundantly over the entire surface, making such markings particularly resistant to partial damage. Especially in this case, a reliable, individualized marking with high information density, high contrast, and at the same time low damage depth cannot be realized by the currently used marking technologies. Together with DIOPTIC GmbH, the Institut für Nanophotonik is developing a corresponding writing technology as well as associated compact reading device with the goal of a successful market launch of this technology within the next two years. In view of the immense market volume, there are very good prospects of success in this respect. Figures 1 and 2 show examples of such markings written directly on stainless steel with a short-pulse laser, as well as the reconstructions of the information contained in each case.



▲
Abbildung 2: Lichtmikroskop-Aufnahme eines mittels Kurzpulslaser-Ablation auf Edelstahl geschriebenen CGH (links) sowie der rekonstruierten Information in Form des DIOPTIC-Logos (rechts).
Figure 2: Light microscope image of a CGH (left) written on stainless steel by short-pulse laser ablation and the reconstructed information in the form of the DIOPTIC logo (right).

Kurze Pulse / Nanostrukturen

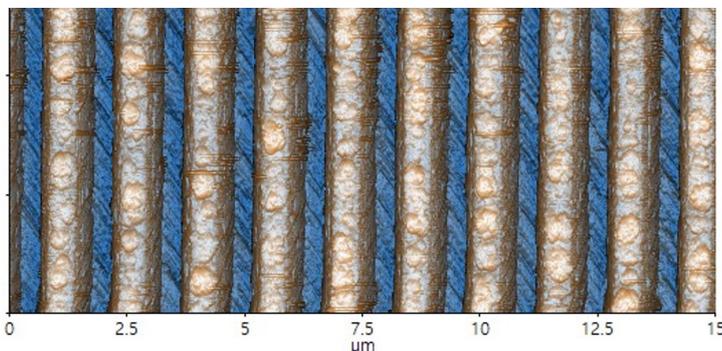
Short Pulses / Nanostructures

Erzeugung periodischer Nanostrukturen mit großem Aspektverhältnis auf Metallen durch direkte Kurzpulslaser-Ablation

Die gezielte Funktionalisierung von Metalloberflächen durch Strukturveränderungen auf der Mikro- bzw. Nanoskala besitzt ein breites Anwendungsspektrum. So lässt sich beispielsweise das Zellwachstum auf Implantaten steuern, der Reibungsverschleiß mechanischer Gleitverbindungen reduzieren, das Haftverhalten von Klebstoffen verbessern und die Kapazität bzw. Effizienz von Energiespeichern erhöhen. In vielen Fällen wird eine Vergrößerung der Oberfläche angestrebt. Sehr vielversprechend sind in diesem Zusammenhang periodische Mikro- und Nanostrukturen mit großem Aspektverhältnis. Die Erzeugung solcher Strukturen auf Metalloberflächen stellt bisher allerdings eine erhebliche Herausforderung dar.

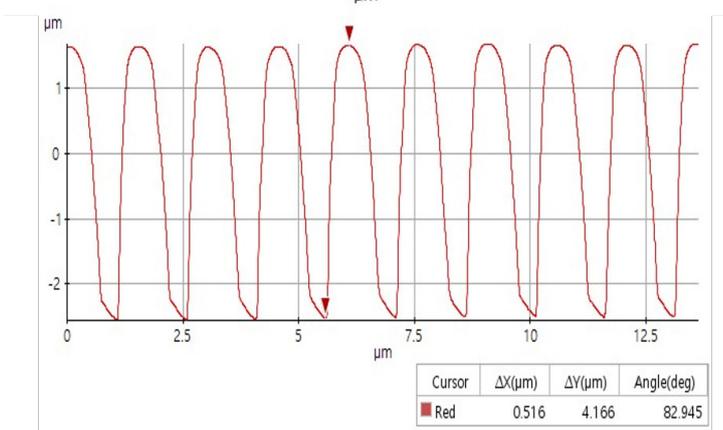
Generation of periodic nanostructures with large aspect ratio on metals by direct short-pulse laser ablation

Tailored functionalization of metal surfaces by structural changes on the micro- or nanoscale has a wide range of applications. For example, cell growth on implants can be controlled, the frictional wear of sliding parts can be reduced, the bonding behavior of adhesives can be improved, and the capacity or efficiency of energy storage devices can be increased. In many cases, the aim is to increase the surface area. Periodic micro- and nanostructures with a large aspect ratio are very promising in this context. However, the generation of such structures on metal surfaces poses a considerable challenge.



◀ Abbildung 1: Atomkraftmikroskop-Aufnahme eines mittels Kurzpulslaser-Ablation auf Edelstahl geschriebenen Gitters mit einer Periode von $1.5 \mu\text{m}$ und einer Modulationstiefe von $4,1 \mu\text{m}$.

Figure 1: Atomic force microscope image of grating written on stainless steel by short-pulse laser ablation with a period of $1.5 \mu\text{m}$ and a modulation depth of $4.1 \mu\text{m}$.



Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Eine Möglichkeit ist ein direkter Materialabtrag mittels interferometrischer Kurzpuls-Laser-Abtragung. Das Institut für Nanophotonik ist seit mehr als 20 Jahren intensiv und sehr erfolgreich auf diesem Gebiet tätig. Jetzt ist es erstmalig gelungen, mittels interferometrischer Kurzpuls-Laser-Abtragung exakt definierte periodische Nanogitter mit einer Periode von 1,5 μm , einer Stegbreite von 800 nm und einer Modulationstiefe von $> 4 \mu\text{m}$ auf Edelstahl zu erzeugen (Abbildung 1 und 2). Dies entspricht einem Aspektverhältnis von mehr als 5! Solche Strukturen besitzen ein großes Anwendungspotenzial z.B. in elektrochemischen Anwendungen, wie Batterien und Reaktoren.

One possibility is direct material ablation by means of interferometric short-pulse laser ablation. The Institut für Nanophotonik has been active in this field for more than 20 years. We demonstrated, for the first time, interferometric short-pulse laser ablation for creating precisely defined periodic nanogrids with a period of 1.5 μm , a ridge width of 800 nm, and a modulation depth of $> 4 \mu\text{m}$ on stainless steel (Figures 1 and 2). This corresponds to an aspect ratio of more than 5! Such structures have a great application potential e.g. in electrochemical applications such as batteries and reactors.

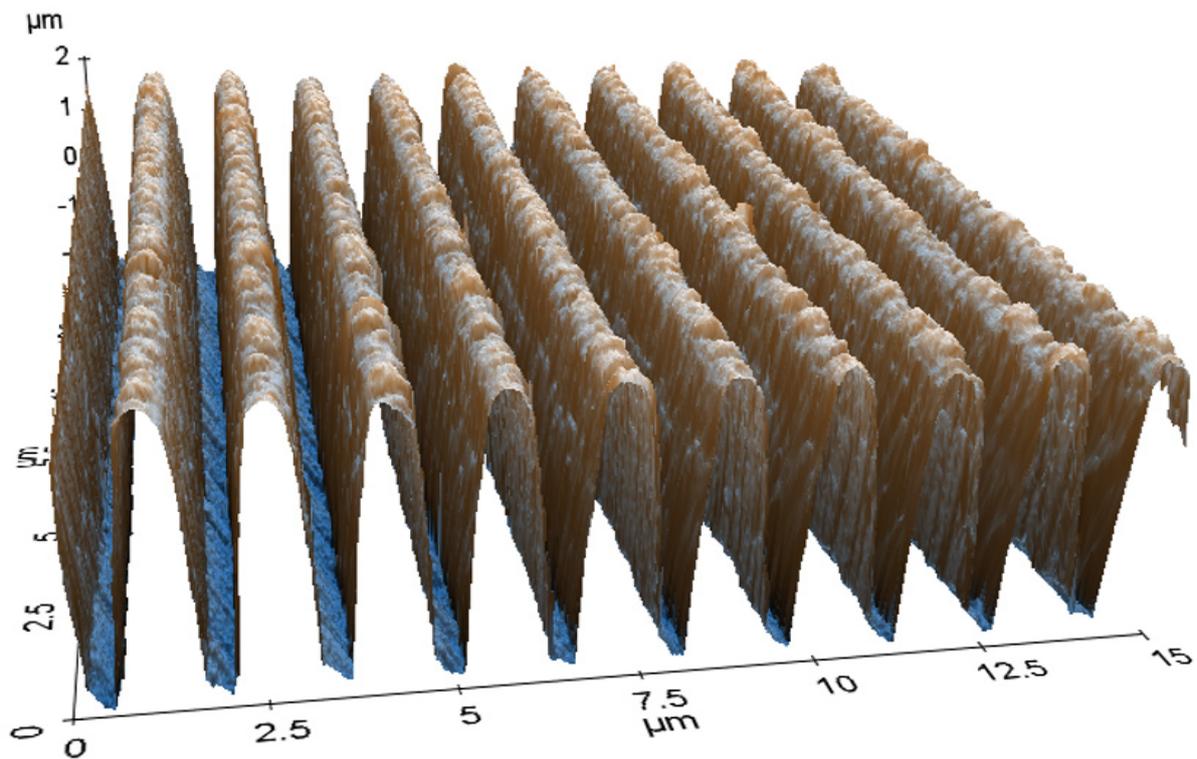


Abbildung 2: Dreidimensionale Ansicht der Aufnahme aus Abbildung 1. Die Skalierung der Achsen ist isotrop.
Figure 2: Three-dimensional view of the image from Figure 1. The scaling of the axes is isotropic.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Plasmonische Nanopartikel in Glas durch Lasertransferimplantation

Kontrast- und detailreiche Markierungen auf oder in Glas sind für viele Anwendungsbereiche wie Produktschutz, Fälschungssicherheit, Rückverfolgbarkeit oder auch als Dekormerkmale sehr gefragt. Zur Herstellung farbiger Markierungen kann das Absorptionsverhalten metallischer Nanopartikel genutzt werden. Gold- oder Silber-Nanopartikel färben Glas aufgrund ihrer Plasmonenresonanz im sichtbaren Spektralbereich. Soll dieses Phänomen zu einer Markierung von Glas oder Glasbauteilen eingesetzt werden, so ist eine praktikable Prozessführung erforderlich, die einen räumlich definierten Eintrag der Nanopartikel ohne komplizierte Prozesstechnik ermöglicht. Ein gangbarer Weg ist die Lasertransferimplantation (LTI), bei der z.B. eine goldbeschichtete transparente Kunststoff-Folie auf das Glasobjekt aufgedrückt und von der Rückseite mit einem gepulsten KrF-Excimerlaser (Wellenlänge 248 nm) bestrahlt wird. Dadurch bilden sich Goldpartikel, die in die gleichzeitig durch die Laserstrahlung erwärmte Glasoberfläche eindringen. Die Methode der LTI stellt somit eine Kombination des bekannten Laser Induced Forward Transfer (LIFT) und der Laserimplantation dar.

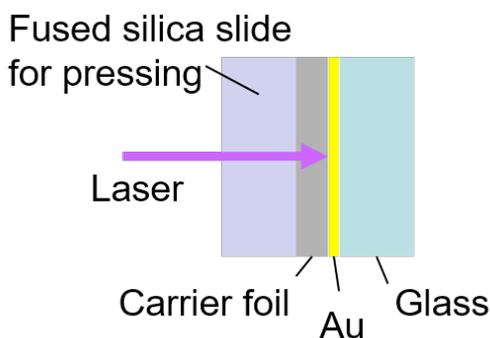


Abbildung 1: Anordnung von goldbeschichteter Trägerfolie und Empfänger-glasprobe bei der Lasertransferimplantation (LTI).
Figure 1: Arrangement of gold-coated carrier foil and receiver glass sample during laser transfer implantation (LTI).

Plasmonic nanoparticles in glass by laser transfer implantation

High-contrast and detailed markings on or in glass are in great demand for many areas of application including product traceability, counterfeit protection, or as decorative features. The absorption behavior of metallic nanoparticles can be used to produce colored markings. Gold or silver nanoparticles color glass due to their plasmon resonance in the visible spectral range. If this phenomenon is to be used to mark glass or glass components, then a practicable handling that enables a spatially defined insertion of the nanoparticles without complicated process technology is required. One feasible way is laser transfer implantation (LTI), in which, for example, a gold-coated transparent film is pressed onto the glass object and irradiated from the back side with a pulsed KrF excimer laser (wavelength 248 nm). Here, gold particles are formed that penetrate the glass surface that is simultaneously heated by the laser radiation.

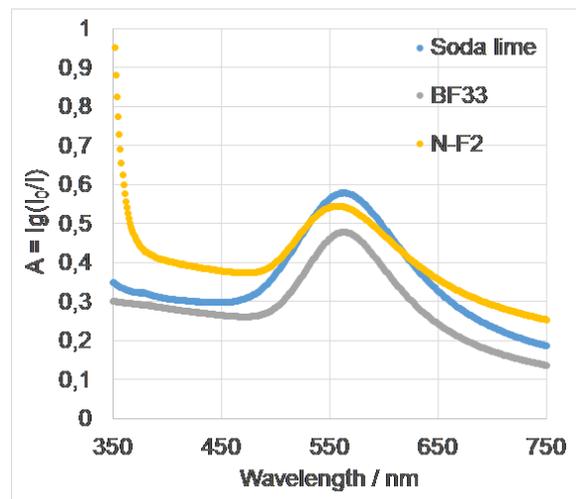


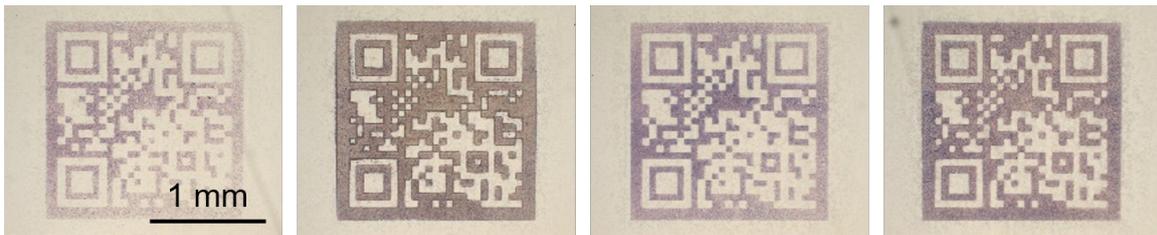
Abbildung 2: Absorptionsspektren verschiedener Glasproben mit lasertransferimplantiertem Gold:
Kalknatronglas, BOROFLOAT® Glas BF33, Flintglas N-F2.
Figure 2: Absorption spectra of various glass samples with laser-transfer-implanted gold:
Soda lime glass, BOROFLOAT® glass BF33, flint glass N-F2.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Mit Hilfe geeigneter Maskentechnik oder Scan-Verfahren können so nahezu beliebige Markierungen ins Glas eingebracht werden. Der resultierende Farbeindruck kann über die Wahl der Bestrahlungsparameter variiert werden.

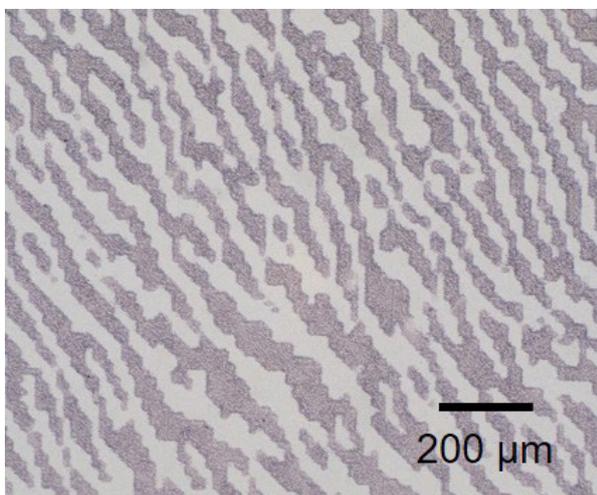
The LTI method thus represents a combination of the well-known Laser-Induced Forward Transfer (LIFT) and laser implantation. With the help of suitable mask technology or scanning processes, almost any markings can be made in the glass.



▲ QR-Codes, hergestellt durch Lasertransferimplantation in Kalknatronglas unter Variation der Bestrahlungsparameter (optisches Mikroskop, Durchlicht).
QR Codes produced by laser transfer implantation in soda lime glass under variation of the irradiation parameters (optical microscope, transmitted light).

Durch Verwendung von Laserwellenlängen im UV sind Strukturauflösungen bis in den μm -Bereich möglich, die mit sonst standardmäßig zur Markierung verwendeten CO_2 -Lasern nicht erreichbar sind. Wenige Laserpulse sind ausreichend, um eine Markierung in Form eines Logos, eines Data-Matrix- oder QR-Codes, eines computergenerierten Hologramms (CGH) oder eines Schriftzugs aufzubringen. Die Anwendbarkeit wurde für verschiedene Glastypen wie Kalknatronglas, Borofloatglas und Flintglas nachgewiesen.

The resulting color impression can be varied by choosing the irradiation parameters. By using laser wavelengths in the UV range, structure resolutions down to the μm range are possible, which cannot be achieved with CO_2 lasers that are otherwise used as standard for marking. A few laser pulses are sufficient to apply a mark in the form of a logo, data matrix, or QR code, computer-generated hologram (CGH) or a lettering. The applicability has been demonstrated for various types of glass including soda lime glass, borofloat glass, and flint glass.



◀ Abbildung 3: Computergeneriertes Hologramm (CGH), hergestellt durch Lasertransferimplantation in Glas: Ausschnitt des 4,2 x 4,2 mm großen CGH, optisches Mikroskop, Durchlicht.
Figure 3: Computer-generated hologram (CGH) produced by laser transfer implantation in glass: Section of the 4.2 x 4.2 mm large CGH, optical microscope, transmitted light.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Schwarze Lasermarkierung auf Glas

Bei der im vorigen Abschnitt beschriebenen Markierungsmethode werden Nanopartikel in das Glas eingebracht. Vielfach ist jedoch das Einbringen von Fremdmaterial in das Glas unerwünscht oder nicht zulässig, beispielsweise in der Medizin oder bei Pharmaverpackungen. In diesem Fall kann z.B. die diffraktive Markierung angewandt werden, bei der in die Glasoberfläche mit dem Laser ein feines Reliefgitter eingeschrieben wird, das zu farbig schillernden Reflexen führt (s. Jahresbericht 2020). Eine weitere Methode stellt die lokale Modifikation des Glasmaterials ohne Zuführung von Zusatzmaterial dar. Beispielsweise bewirkt die Bestrahlung von TiO_2 -haltigem Glas mit einem ArF-Excimerlaser (193 nm, 20 ns) mit einer bestimmten Laserfluenz eine Phasenseparation von Si-reicher und Ti-reicher Phase nahe der Glasoberfläche, was zu einer buckligen, lichtstreuenden Oberflächen-Mikrostruktur führt. Zusammen mit einer ebenfalls bewirkten Reduktion von TiO_2 zu TiO_x mit $x < 2$ führt dies zu einer Schwärzung der Glasoberfläche.

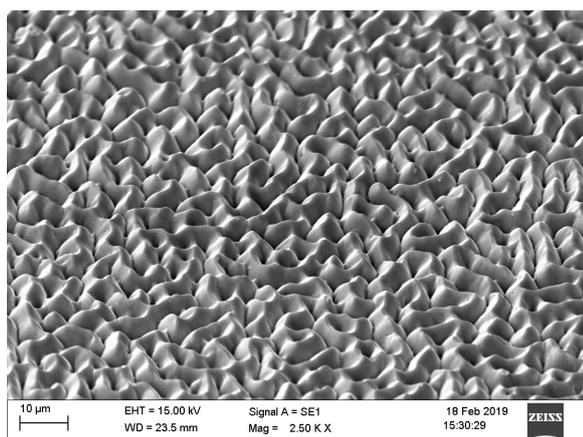


Abbildung 1: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme (Blickwinkel 45°) der laserinduzierten Oberflächenmodifizierung von N-F2-Glas durch ArF-Excimer-Laserbestrahlung.
Figure 1: Scanning electron microscope image (viewing angle 45°) of the laser-induced surface modification of N-F2 glass by ArF excimer laser irradiation.

Black marking on glass

With the marking method described in the previous section, nanoparticles are implanted into the glass. In many cases, however, the introduction of foreign material into the glass is undesirable or not permitted for example in medicine or in pharmaceutical packaging. In this case, for example, diffractive marking can be used, where fine relief grating is written into the glass surface with the laser, which leads to opalescent reflections (see annual report 2020). Another method is the local modification of the glass material without adding additional material. For instance, the irradiation of TiO_2 -containing glass with an ArF excimer laser (193 nm, 20 ns) at a specific fluence causes a phase separation of Ti-rich and Si-rich phases near the glass surface, which leads to a humped, light-scattering surface microstructure.



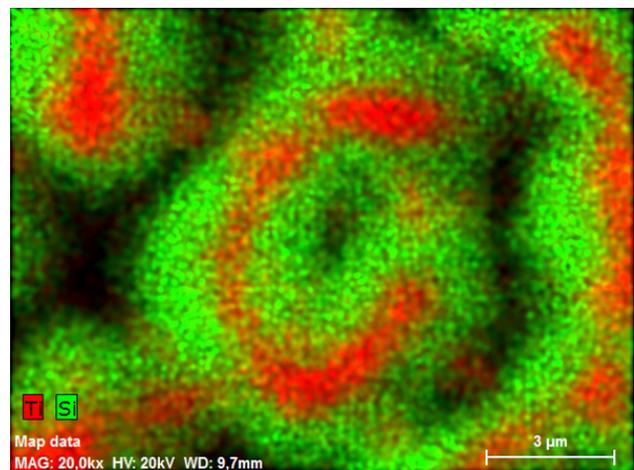
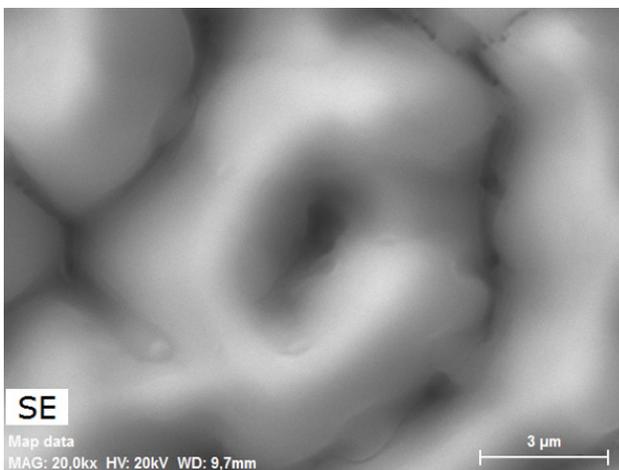
Abbildung 2: QR-Code durch Lasermodifikation von N-SF11-Glas.
Figure 2: QR code made by laser modification of N-SF11 glass.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Substöchiometrisches TiO_x ist im Gegensatz zu stöchiometrischem TiO_2 im Sichtbaren stark absorbierend. So können mittels Maskentechnik oder Scan-Verfahren schwarze Muster, Codes oder Beschriftungen mit hoher Auflösung hergestellt werden. Bei Verwendung einer Wellenlänge von 193 nm ist im Gegensatz zum Fall des Einsatzes längerer Wellenlängen keine spezielle Umgebungsatmosphäre erforderlich; der Markierungsprozess kann in Luftumgebung erfolgen. Die Markierung ist kontrastreich, kratzfest und temperaturstabil. Sie ist insbesondere geeignet für hochbrechende Gläser, die zur Vermeidung von Gesundheitsgefahren heutzutage unter Verwendung von Titanoxid statt Bleioxid hergestellt werden. In der Optik gebräuchliche Flintgläser wie N-F2 und N-SF11 (Schott) enthalten etwa 10% bis 30% Titanoxid.

Together with a likewise effected reduction of TiO_2 to TiO_x with $x < 2$, this leads to a blackening of the glass surface. Substoichiometric TiO_x is strongly absorbing in the visible spectrum in contrast to stoichiometric TiO_2 . Black patterns, codes, or labels with high resolution can be produced using mask technology or scanning processes. When using a wavelength of 193 nm, in contrast to the case where longer wavelengths are used, no special ambient atmosphere is required; the marking process can be carried out in an air environment. The marking is high contrast, scratch-resistant, and temperature stable. It is particularly suitable for high-index glasses, which today are produced using titanium oxide instead of lead oxide in order to avoid health risks. Flint glasses commonly used in optics such as N-F2 and N-SF11 (Schott) contain around 10 to 30% titanium oxide.



▲
Abbildung 3: Links, rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer laserbestrahlten Oberfläche von N-F2-Glas. Rechts: Element-Mapping desselben Bereichs, aufgenommen durch energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX). In der Falschfarbendarstellung erscheinen Ti-reiche Bereiche rot und Si-reiche Bereiche grün.
Figure 3: Left, scanning electron microscope image of a laser-irradiated surface of N-F2 glass. Right: Element mapping of the same area, recorded by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX). In the false color representation, Ti-rich areas appear red and Si-rich areas appear green.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Formkorrektur von Glassubstraten durch elastische Verformung mittels laserinduzierter Oberflächenspannungen

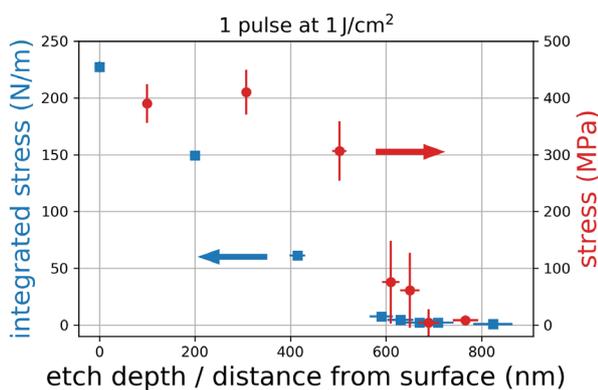
Die Qualität optischer Komponenten wird unter anderem durch die Formgenauigkeit der optischen Oberflächen bestimmt. In den letzten Jahren wurden Methoden zur spannungsbasierten Formkorrektur von Spiegelsubstraten erforscht, bei denen in einen oberflächennahen Bereich der Rückseite des Spiegelsubstrats ein Feld ebener Spannungen eingebracht wird, das zu einer gezielten elastischen Verformung des Spiegels führt. Hierdurch lassen sich langreichweitige Formfehler korrigieren, die z. B. durch eine spannungsbehaftete Spiegelschicht, Ungenauigkeiten in der Fertigung oder äußere Einflüsse entstehen.

Wir entwickeln eine Methode, bei der die ebenen Spannungen mittels Bestrahlung mit einem Excimerlaser eingebracht werden.

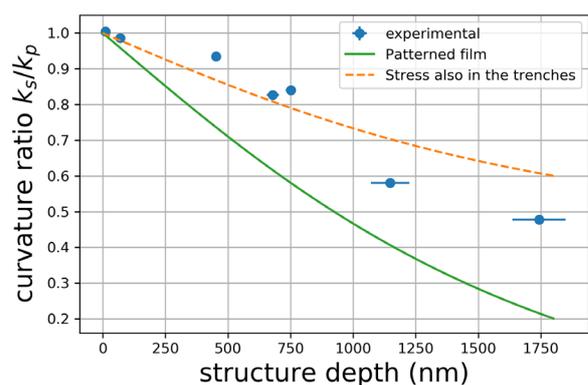
Figure correction of glass substrates via elastic deformation using laser-induced surface stresses

Among others, the quality of optical components is determined by their precision in term of surface topography. Recently, methods for stress-induced figure correction of mirror substrates have been investigated. They rely on the introduction of a plane stress field inside a near-surface region on the back side of the substrate that then causes a specific elastic deformation. Thus, form errors of small spatial frequency can be corrected. For example, such errors are generated by deposition of a stressed functional film, uncertainties in the fabrication process, or external influences.

We developed a method in which the plane stress field is introduced by irradiation with an excimer laser.



▲
Abbildung 1: Die integrierte Spannung in Abhängigkeit von der Ätztiefe und die daraus abgeleitete Spannungsverteilung in Richtung senkrecht zur bestrahlten Oberfläche.
Figure 1: The integrated stress dependence on the etch depth and the stress distribution along the direction normal to the irradiated surface.



▲
Abbildung 2: Für eine in Linien strukturierte Oberfläche ist das Verhältnis k_s/k_p der Krümmungsänderung quer zu den Linien k_s zur Krümmungsänderung entlang der Linien k_p gegen die Tiefe der Linien aufgetragen. Die Linienperiode beträgt $8\ \mu\text{m}$. Die experimentellen Daten werden mit zwei analytischen Gleichungen verglichen.
Figure 2: For a surface patterned into narrow lines of a period of $8\ \mu\text{m}$, the curvature ratio k_s/k_p of curvature change k_s across the lines divided by curvature change k_p along the lines is plotted depending on the trench depth. The experimental results are compared to two analytical equations.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Excimerlaser bieten gute Absorptionseigenschaften in vielen handelsüblichen Gläsern und die Möglichkeit zur parallelen Bearbeitung großer Flächen. Durch die thermische Ausdehnung des bestrahlten Materials entsteht lokal eine Druckspannung, die bei ausreichender Viskositätsverringerung teilweise relaxieren kann. Beim Wiedererkalten des bestrahlten Bereichs entsteht durch die thermische Kontraktion eine dauerhafte Zugspannung. Über Ätzversuche konnten wir die Spannungsverteilung in der bestrahlten Oberfläche des Glases Schott D263 bestimmen (Abb. 1). Die Dicke des vorgespannten Bereichs beträgt ca. 650 nm und es wird eine Zugspannung von ca. 400 MPa erreicht. Für präzise Korrekturen müssen häufig neben equibiaxialen (lateral isotropen) Spannungskomponenten auch uniaxiale Spannungskomponenten erzeugt werden. Dies geschieht über eine Linienstrukturierung der Oberfläche. Abb. 2 demonstriert den Effekt einer solchen Linienstruktur auf das Verhältnis der Krümmung in Richtung quer zu derjenigen entlang der Linien. Ein Krümmungsverhältnis kleiner eins zeigt hier die Existenz uniaxialer Spannungskomponenten an. Abb. 3 zeigt ein Beispiel der Linienstrukturierung.

Excimer lasers offer strong absorption in many common glass materials and the possibility for processing large areas in parallel. Thermal expansion of the irradiated material causes the generation of compressive stress, which, if the viscosity is simultaneously sufficiently reduced, partly relaxes. By the time the irradiated material has cooled, thermal contraction then causes the generation of a permanent tensile stress. With etching experiments, we were able to determine the stress distribution along a normal direction inside the irradiated surface of the glass Schott D263 (Fig. 1). The thickness of the stressed layer is about 650 nm, and a tensile stress of about 400 MPa is reached. For precise corrections, besides equibiaxial (isotropic) plane stress components, uniaxial components also often need to be induced. This is obtained by laser processing of the surface into a line pattern. Fig. 2 demonstrates the influence of such a line pattern on the curvature ratio of curvatures in the direction across and along the lines. A curvature ratio smaller than one indicates the existence of uniaxial plane stress components. Fig. 3 shows an example of a line pattern.

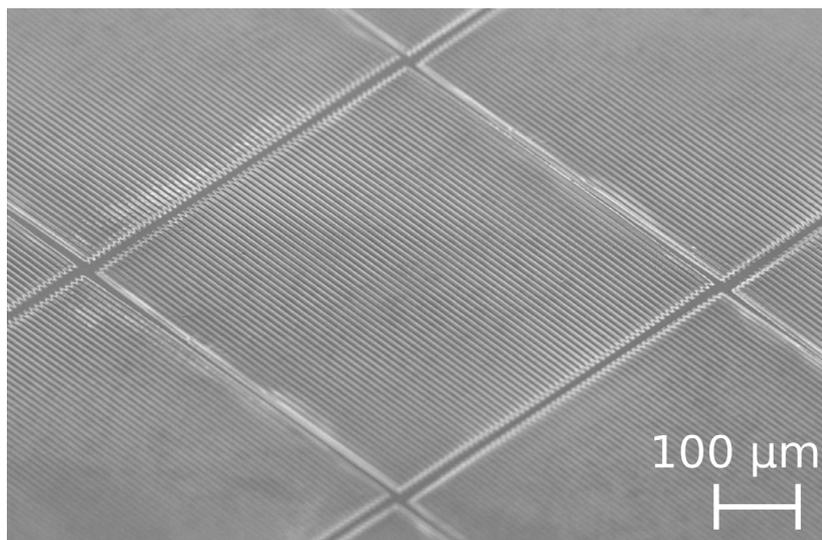


Abbildung 3: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme einer Glasoberfläche, die mit einer Linienstruktur beaufschlagt wurde. Die Blickrichtung ist um 45° zur Oberflächennormalen geneigt.
Figure 3: Scanning electron microscopy image of a line patterned glass surface. The view is inclined by 45° with respect to the surface normal.

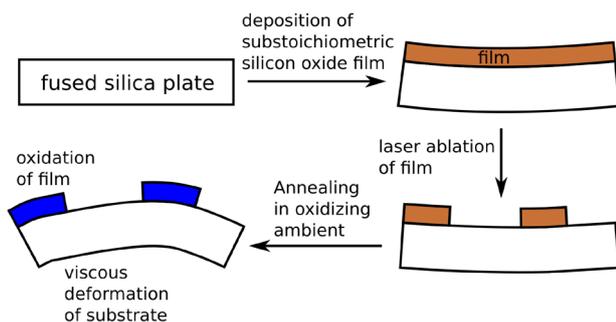
Kurze Pulse / Nanostrukturen

Short Pulses / Nanostructures

Formgebung von Quarzglassubstraten mittels einer laserstrukturierten Spannungsschicht und viskosem Fließen

Durch Freiformoberflächen können optische Aufbauten vereinfacht, ihre Leistung verbessert und gänzlich neue Konzepte realisiert werden. Freiformoptiken werden üblicherweise durch mechanischen Materialabtrag oder Abformen hergestellt. Hierbei muss die freigeformte Oberfläche aufwendig poliert werden oder es bedarf der Herstellung eines Negativs.

Wir entwickeln eine Methode, bei der ein planar und bereits poliertes Glassubstrat im heißen Zustand über eine zuvor aufgebrachte und laserstrukturierte dünne Schicht spezifisch und irreversibel verformt wird. Hierdurch entfällt die nachträgliche Politur der Freiformoberfläche und der Prozess ist flexibel, weil kein Negativ benötigt wird. Der untersuchte Prozess zur Formgebung von Quarzglassubstraten ist in Abbildung 1 dargestellt.

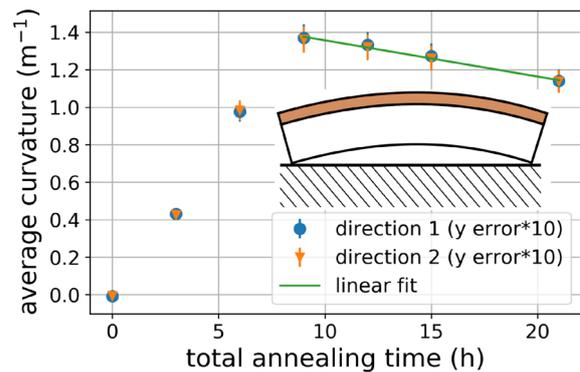


▲ Abbildung 1: Der untersuchte Prozess zur Herstellung von freigeformten Quarzglassubstraten.
Figure 1: Scheme of the studied process for fabrication of free-form fused silica glass substrates.

Shaping of fused silica substrates using a laser-patterned stressed film and viscous flow

Free-form surfaces allow for the simplification of optical setups, increases in their performance, and radically new concepts. Free-form optics are usually produced by mechanical material removal or molding. In these processes, the free-form surface needs to be polished and/or a mold needs to be produced.

We are developing a method in which a planar and already polished glass substrate is specifically and nonreversibly deformed at high temperature by a previously deposited and laser-patterned thin film. Thus, a final polishing process of the free-form surface is no longer necessary, and the process is highly flexible because no mold is required. The underlying process is sketched out in Figure 1.



▲ Abbildung 2: Die Krümmung eines 1 mm dicken Quarzglassubstrats in Abhängigkeit von der absoluten Temperdauer für eine geschlossene Schicht.
Figure 2: The curvature dependence on total annealing time for a 1 mm thick fused silica substrate covered by a continuous film.

Kurze Pulse / Nanostrukturen

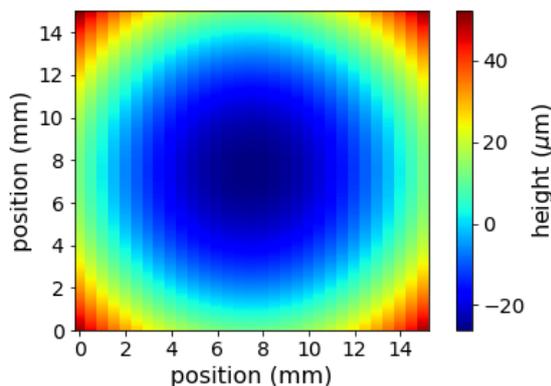
Short Pulses / Nanostructures

Es wird eine dünne Schicht aus einem substöchiometrischen Siliziumoxid auf die Rückseite des Substrats aufgebracht und mit einem Excimerlaser binär strukturiert. Während eines Temperschritts nahe der Glasübergangstemperatur oxidiert die Schicht, wodurch eine Druckspannung entsteht, und die Viskosität des Substrats wird so weit herabgesetzt, dass es zu einer viskosen Verformung aufgrund der Schichtspannung kommt.

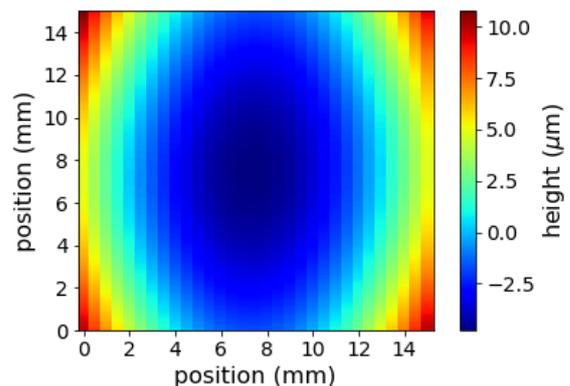
Die Krümmungsänderung der nicht beschichteten Seite eines 1 mm dicken Quarzglassubstrats ist in Abbildung 2 gegen die Temperdauer aufgetragen. Während der Oxidation der Schicht nimmt die Krümmung zu. Tempert man nach vollständiger Oxidation weiter, findet wieder eine Abnahme statt. Abbildung 3 zeigt die Topographie eines sphärischen Hohlspiegels mit einer Brennweite von ca. 360 mm, und Abbildung 4 zeigt die Topographie eines Freiformspiegels mit unterschiedlichen Krümmungsradien in unterschiedliche Richtungen. Beide Proben wurden mit der beschriebenen Methode hergestellt.

The back side of the substrates is coated by a thin film of substoichiometric silicon oxide, which is subsequently patterned into a binary height distribution by excimer laser irradiation. During annealing at a temperature close to the glass transition, the film oxidizes, which causes a compressive stress, and the viscosity of the substrate is low enough to allow significant viscous deformation due to the film stress.

Figure 2 shows the curvature evolution of a 1 mm thick fused silica substrate during annealing. During oxidation of the film, the curvature increases. If annealing is continued after oxidation is complete, the curvature decreases again. Figure 3 shows the height map of a spherical concave mirror with a focal length of about 360 mm. Figure 4 shows the height map of a free-form mirror with two different curvature values in two different directions. Both samples were produced via the described method.



▲ Abbildung 3: Höhenkarte der nicht beschichteten Oberfläche eines 1 mm dicken Substrats nach der Verformung durch eine geschlossene Schicht. Die vertikalen Streifen sind ein Artefakt der Messmethode.
Figure 3: Height map of the noncoated surface of a 1 mm thick fused silica substrate after deformation using a continuous film. The vertical stripes are an artifact of the measurement method.



▲ Abbildung 4: Höhenkarte der nicht beschichteten Oberfläche eines 1 mm dicken Substrats nach der Verformung durch eine in Linien strukturierte Schicht.
Figure 4: Height map of the noncoated surface of a 1 mm thick substrate after deformation by a line patterned film.

Berichte aus der Abteilung Departmental Reports



Dr. Klaus Mann
Abteilungsleiter

T +49 551/5035-41
F +49 551/5035-99
M klaus.mann@ifnano.de

MITARBEITENDE / STAFF MEMBERS

Dr. Marcus Muchow

Sascha Bickhardt

Maik Lübbecke

Dr. Dirk Raiser

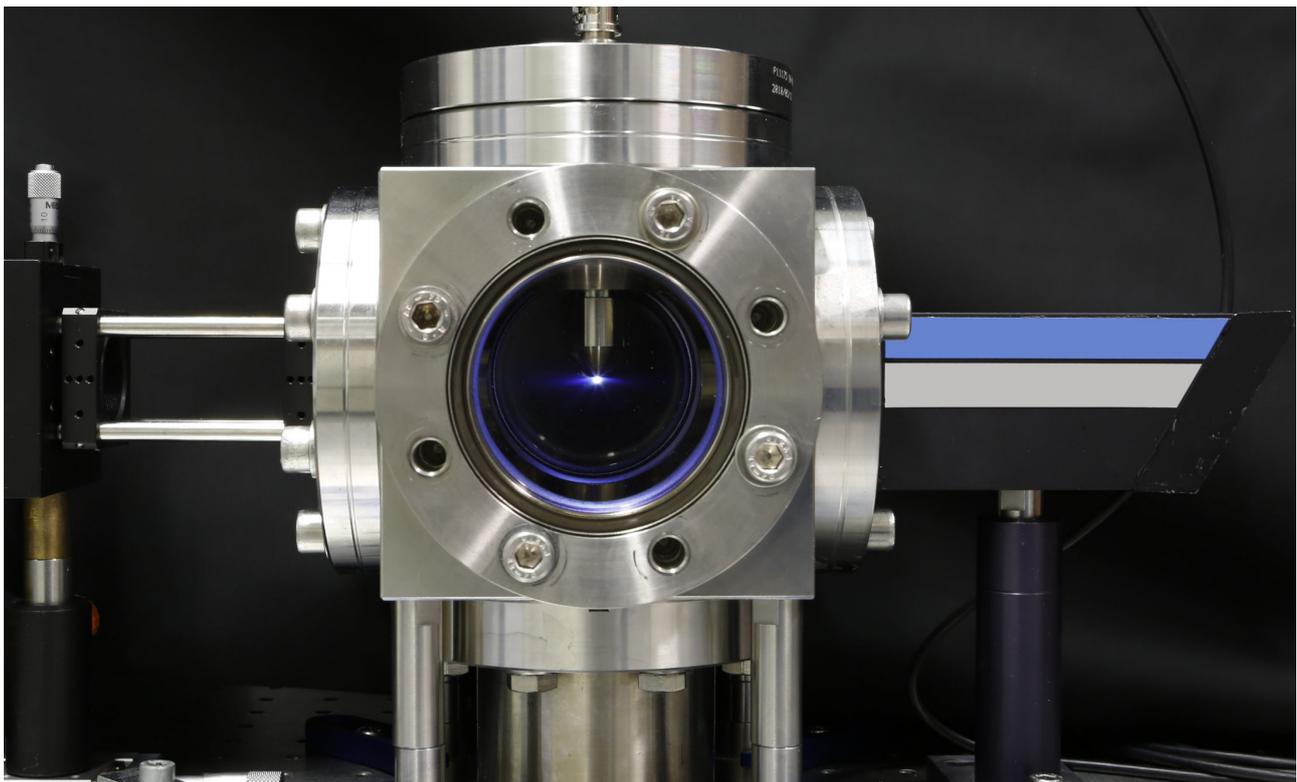
Jens-Oliver Dette

Meike Schellhorn

Dr. Bernd Schäfer

Jonathan Holburg

Dr. Jennifer Zimara



Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Die Abteilung „Optik / Kurze Wellenlängen“ des Instituts für Nanophotonik beschäftigt sich mit der Propagation von Laserstrahlung, d.h. einerseits mit dem Abstrahlverhalten von Lasern, andererseits auch mit der Charakterisierung von Hochleistungsoptiken zur Strahlführung. Der Schwerpunkt liegt auf den für die Halbleiter-Lithographie relevanten tiefen UV-Wellenlängen, alle anderen gebräuchlichen Laser-Wellenlängen sind aber ebenso verfügbar.

Es werden Messapparaturen zur umfassenden Bewertung der Qualität und der Strahlungsstabilität optischer Komponenten betrieben. Damit lassen sich u.a. deren Absorption, thermische Linseneffekte, Zerstörschwellen sowie das Langzeit-Degradationsverhalten präzise ermitteln. Zusätzlich werden auch die Propagations- und Kohärenzeigenschaften von Laserstrahlung vermessen, u.a. mit verschiedenen hochauflösenden Wellenfrontsensoren.

Außerdem wird an der Weiterentwicklung kompakter Quellen für EUV- und weiche Röntgenstrahlung gearbeitet; diese ermöglichen bereits jetzt diverse messtechnische Anwendungen (Absorptionsspektroskopie zur chemischen Analytik (NEXAFS), Reflektometrie, Röntgenmikroskopie im „Wasserfenster“). Die Fokussierung der kurzwelligen Strahlung mit geeigneten Optiken gestattet zudem Stabilitätstests auch an EUV-optischen Materialien und Sensoren bei 13,5 nm.

The Optics / Short Wavelengths department of the Institut für Nanophotonik is concerned with the characterization of laser sources as well as high-quality optics for beam steering and shaping. Our main focus is the deep UV wavelengths relevant for semiconductor microlithography. Other common laser wavelengths are also available.

Various measuring devices for assessment of the efficiency and stability of heavily loaded optical components are employed. This allows for, among others things, at-wavelength determination of laser-induced damage thresholds, thermal lensing, and monitoring of absorption and degradation behavior. In addition, the propagation and the coherence properties of laser radiation are precisely characterized with the help of specially designed Hartmann-Shack wave-front sensors.

Furthermore, compact EUV / XUV sources for metrological applications with soft X-rays are being developed (optics testing, reflectometry, NEXAFS for chemical analysis, “water window” microscopy). Stability tests of EUV optics and sensors at 13.5 nm are accomplished by focusing the short wavelength radiation with the help of appropriate optical elements.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Charakterisierung von Laseroptiken

Ziel der über 20-jährigen Aktivitäten zur Optik-Charakterisierung ist es, durch ein tieferes Verständnis der Wechselwirkungsmechanismen zwischen intensiver Laserstrahlung und optischen Materialien eine Optimierung der Herstellungs- und Beschichtungsverfahren zu ermöglichen. Während dabei früher aufgrund akuter Materialprobleme die Messung der makroskopischen Zerstörschwelle (engl. LIDT-Messungen, siehe Abb. 1) im Vordergrund stand, ist jetzt die Degradation optischer Materialien bei den für die Halbleiter-Lithographie relevanten DUV-Wellenlängen (z. B. durch Farbzentrenbildung oder nichtlineare Effekte) von großer Bedeutung. Zusätzlich spielt angesichts stetig steigender mittlerer Laserleistungen die Deformation der Wellenfront aufgrund thermischer Effekte in den Optiken eine immer größere Rolle.

Characterization of laser optics

The aim of the activities in the area of optics characterization over the last 20 years is now to provide a deeper understanding of the basic mechanisms of the interaction between intense laser radiation and optical materials in order to optimize the manufacturing and coating processes. While in earlier times a major focus was put on measuring short-term damage thresholds (LIDT tests, see Fig. 1), now the degradation of UV optical materials e.g. by color center formation or non-linear effects is of great importance, especially for the semiconductor lithography wavelengths 248 and 193 nm. In addition, due to steadily increasing laser powers, the thermally induced wave front deformation in laser optics has become an issue of increasing relevance.

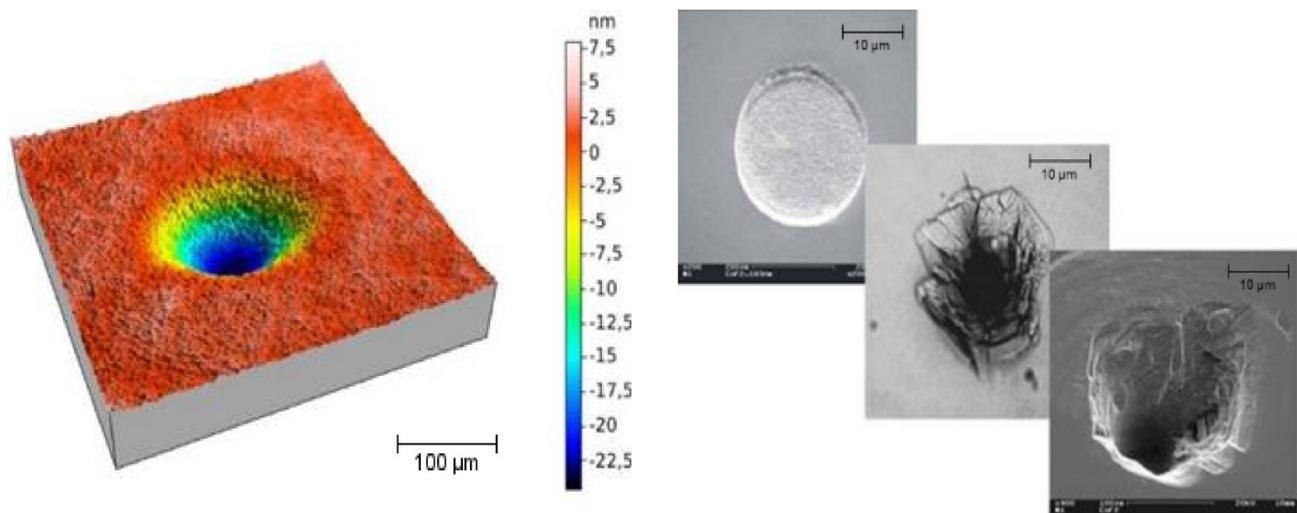


Abbildung 1: (links) Kompaktierung einer Quarz-Probe durch ArF-Excimerlaser-Bestrahlung (108 Pulse, Weißlicht-Interferogramm) und (rechts) morphologische Schädigungen optischer Komponenten bei der LIDT-Bestimmung.

Figure 1: (left) Compaction of a quartz sample under ArF excimer laser irradiation (108 pulses, white light interferogram) and (right) morphological damage of optical components after LIDT testing.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Als Schlüsselparameter für die Stabilität optischer Materialien ist die Absorption anzusehen: Die im Volumen und vor allem an der Oberfläche bzw. der Beschichtung von Optiken absorbierte Laserstrahlung führt zu einer inhomogenen Temperaturverteilung, die infolge thermischer Ausdehnung sowie Brechungsindexgradienten und inneren Spannungen im Material mit dem Auftreten einer „thermischen Linse“ verbunden ist. Dieser unerwünschte Effekt lässt sich zur quantitativen Bestimmung der Absorption optischer Materialien nutzen. Hierzu wurde ein auf Wellenfrontmessungen mit einem hochempfindlichen Hartmann-Shack-Sensor basierendes photothermisches Messsystem entwickelt und in den letzten Jahren zur Absorptionsmessung bei zahlreichen relevanten Laser-Wellenlängen im NIR-, VIS- und UV-Bereich eingesetzt (siehe Abb. 2). Der experimentelle Aufbau wurde zuletzt um ein Probenpositioniersystem erweitert, so dass die Absorption nun auch orts aufgelöst erfasst werden kann (siehe Konturdarstellungen).

A key parameter for the stability of optical materials is the absorption: the absorbed laser radiation in the bulk and especially on the surface or coating of optics leads to an inhomogeneous temperature distribution that is, due to thermal expansion, refractive index gradients and internal stresses in the material, associated with the occurrence of a “thermal lens”. This undesirable effect can, however, be employed for a quantitative determination of the absorption of optical materials.

For this purpose, a photothermal measuring system based on wave front measurements with a high-sensitivity Hartmann-Shack sensor was developed and applied in recent years for absorption measurements at several relevant laser wavelengths in the NIR, VIS, and UV range (see Fig 2). Recently, the experimental setup was extended by a sample positioning system that allows the measurement of spatially resolved absorption (see contour plots).

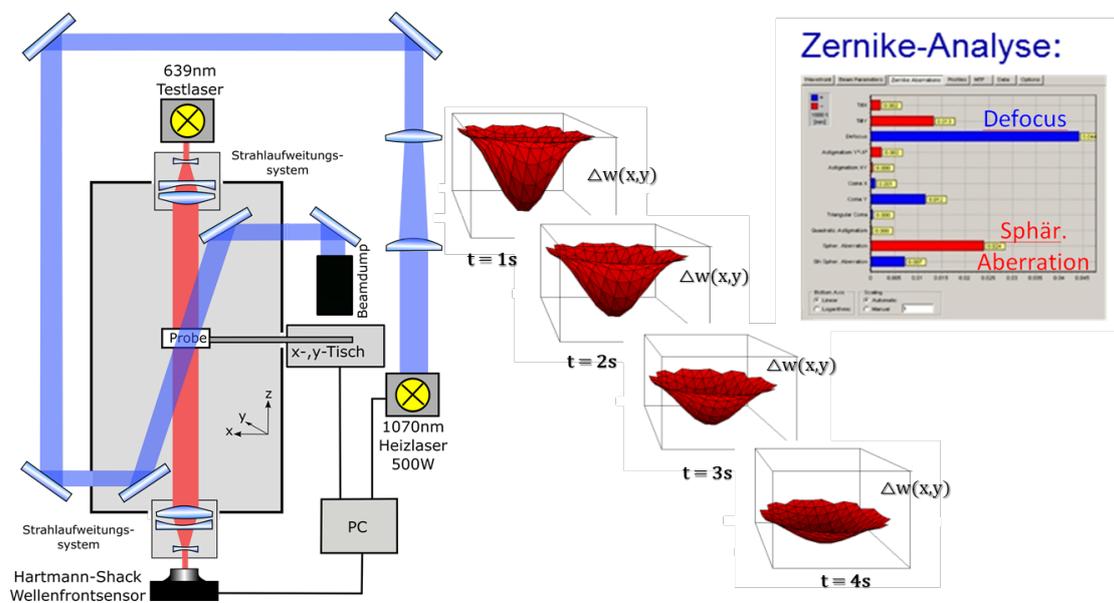


Abbildung 2.: Aufbau des photothermischen Messsystems zur quantitativen Auswertung des "Focus shift"-Effekts und der induzierten Aberrationen.

Figure 2: Setup of the photothermal measuring system for quantitative evaluation of the focus shift effect and the induced aberrations.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Hyperspektralmessung zur Charakterisierung von Schichtuniformitäten

Im BMBF-Projekt „EPIC-Lens“ wird ein Messsystem zur Uniformitätskontrolle optischer Präzisionsbeschichtungen auf der Grundlage hyperspektraler Messtechnik entwickelt. Projektziel ist es, eine in-situ-Messtechnik mit hoher örtlicher sowie spektraler Auflösung zu entwickeln, die bereits während der Beschichtung von Planoptiken zur Qualitätskontrolle eingesetzt werden kann.

Optische Strahlführung, die automatisierte Datenaufnahme und -auswertung, insbesondere die Verarbeitung der hyperspektralen Messdaten, sind essentielle Bestandteile zur Umsetzung des Messsystems, das bereits erfolgreich im ex-situ-Laboraufbau getestet wurde. Die Hyperspektralkamera erzeugt aufgrund wellenlängensensitiver Bänder (B) spektralaufgelöste Transmissionsbilder (T) entlang einer Ortskoordinate.

Characterization of coating uniformities using a hyperspectral measurement technique

Within the BMBF project EPIC-Lens, starting in 2018, the Optics / Short Wavelengths department has been developing a new in situ diagnostic system based on a hyperspectral measurement technique in order to detect inhomogeneities in optical coating processes with high spectral and spatial resolution. The automated data acquisition and data analysis are an essential part of this diagnostics system and could already be demonstrated in ex situ measurements (see Fig. 1). Due to wavelength sensitive bands (B), the hyperspectral camera generates spectrally resolved transmission images (T) along one spatial coordinate. The progressive feed of the sample sequentially yields the second spatial coordinate. As a result, a 3D data cube (x, y, T) is generated.

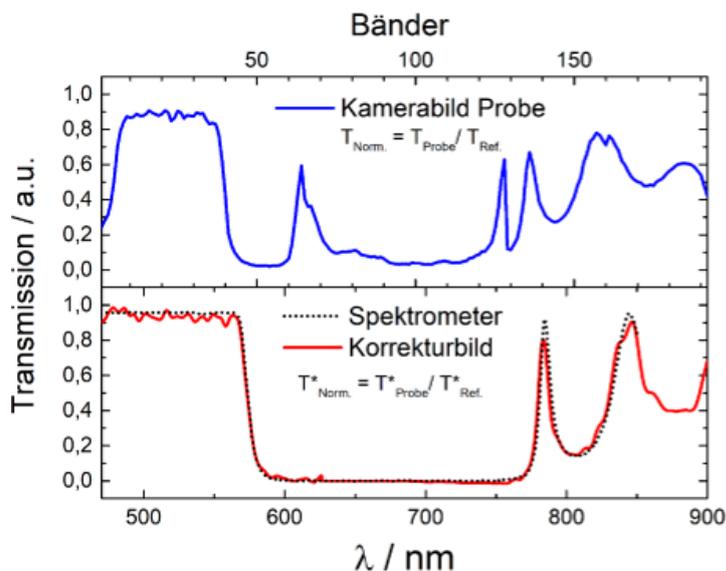


Abbildung 1: (links) Spektrale Transmission aus unkorrigiertem Kamerabild ($T_{\text{Norm.}}^*$) in Abhängigkeit der Bandinformation an einer beliebigen Ortskoordinate (oben) sowie korrigiertes Kamerabild ($T_{\text{Norm.}}^*$) im Vergleich zu Spektrometerdaten. (Rechts) oberer Arm der hyperspektralen Messanordnung, installiert an der Bedampfsanlage der BTE-Bedampfungstechnik GmbH.

Figure 1: (left) Spectral transmission from an uncorrected camera image ($T_{\text{Norm.}}^*$) dependent on band information in comparison to the spectrally corrected image ($T_{\text{Norm.}}^*$) and corresponding spectrometer data. (Right) The upper part of the hyperspectral setup installed at BTE-Bedampfungstechnik GmbH.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Über den Vorschub der Probe wird sequenziell die zweite Ortskoordinate vermessen. Auf diese Weise wird ein 3D-Datenwürfel (x, y, T) generiert. Die reine Bandinformation kann jedoch nicht unmittelbar mit der spektralen Information gleichgesetzt werden, da die Bänder zum Teil für mehrere Wellenlängen aktiv sind und zunächst über numerische Optimierungsverfahren korrigiert werden müssen (siehe Abb. 1). Je nach Fragestellung können letztlich unterschiedliche Abhängigkeiten mit dem Datenwürfel betrachtet werden. Anhand einer x - y -Oberflächendarstellung (siehe Abb. 2) kann beispielsweise die örtliche spektrale Homogenität überprüft und der Beschichtungsprozess entsprechend optimiert werden.

However, spectral camera bands may be sensitive to more than one wavelength. Therefore, the band information is not directly comparable to spectral information, requiring additional numerical optimization processes (see Fig. 1). With the wavelength-corrected data cube, different sample properties can be addressed.

For example, on an x - y surface plot, local spectral coating inhomogeneities can be visualized (see Fig. 2), qualifying the actual coating process.

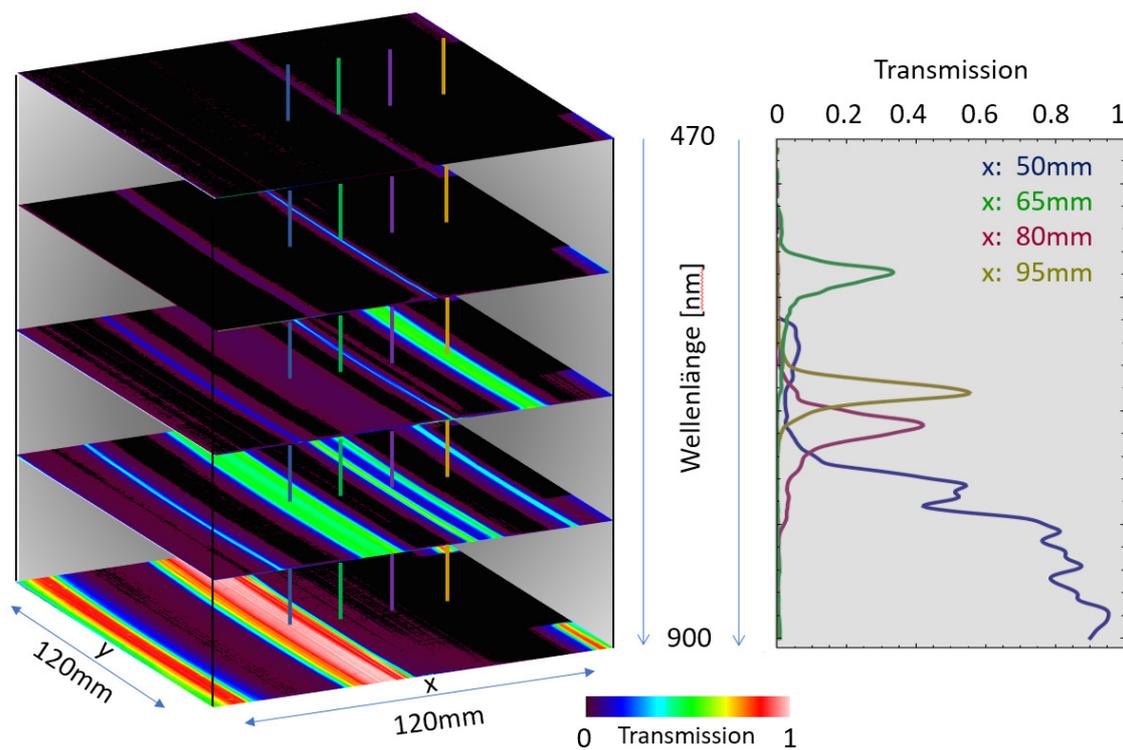


Abbildung 2: Transmission eines gemessenen „Regenbogen“-Spektralfilters für fünf verschiedene Wellenlängen. Die örtliche Variation der spektralen Transmission in x -Richtung ist deutlich zu erkennen. Das rechte Diagramm zeigt den spektralen Transmissionsverlauf an vier verschiedenen x -Positionen.

Figure 2: Laterally resolved transmission of a measured “rainbow” spectral filter for five different wavelengths. Strong horizontal variations of spectral transmission are evident. The diagram on the right shows transmission spectra at four different x -positions.

Optik / Kurze Wellenlängen Optics / Short Wavelengths

Wellenfrontsensor für den MIR-Spektralbereich bis 2,3 μm

2021 startete zusammen mit dem Projektpartner Holoeye Photonics AG das ZIM-Kooperationsprojekt „Räumlicher Lichtmodulator (SLM) für die Freistrahkommunikation bei 2,1 μm Wellenlänge inkl. Kodierung von Lichtpulsen über den Bahndrehimpuls (OAM)“ – SLM4OAM. Projektziel ist die Entwicklung eines räumlichen Lichtmodulators für den MIR-Spektralbereich, der eine hochauflösende und hochgenaue Phasenmodulation von MIR-Quellen gestattet. Es ist geplant, mit Hilfe dieses Elements, Phasenvortices unterschiedlicher topologischer Ladung zu erzeugen, als Grundlage für eine Freistrah-Kommunikationsstrecke bei der Wellenlänge 2,1 μm mit Bahndrehimpuls-Kodierung der Photonen, die im Rahmen des Projekts realisiert und getestet werden soll.

Wave front sensor for the MIR spectral range up to 2.3 μm

In 2021, IFNANO started, together with project partner Holoeye Photonics AG, the ZIM cooperation project "Spatial light modulator (SLM) for free-beam communication at 2.1 μm wavelength including coding of light pulses via the orbital angular momentum (OAM)" - SLM4OAM. The aim of the project is to develop a spatial light modulator for the MIR spectral range, that allows high-resolution and highly accurate phase modulation of MIR sources. The plan is to use this element in order to generate phase vortices of different topological charges as the basis for a free-space communication line with orbital angular momentum encoding of photons, which is to be realized and tested within the framework of the project.



Abbildung 1: Design und Komponenten des Wellenfrontsensors für den MIR-Spektralbereich basierend auf Standard-Komponenten und einem dünnen BBO-Kristall für die MIR-VIS-Konversion. Aufgrund der hohen Ortsauflösung des CMOS-Chips kann ein Mikrolinsenarray mit für die hochauflösende Wellenfrontanalyse geeigneten Werten der Parameter Pitch und Brennweite eingesetzt werden.

Figure 1: Design and components of the wave front sensor for the MIR spectral range based on standard components and a thin BBO crystal for the MIR-VIS conversion. Due to the high spatial resolution of the CMOS chip, a microlens array with the parameters pitch and focal length suitable for high-resolution wave front analysis can be utilized.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Ziel des IFNANO-Teilvorhabens ist dabei der Aufbau eines Hartmann-Shack-Wellenfrontensensors für gepulste Quellen im MIR-Spektralbereich, der innerhalb des Projekts sowohl zur Strahlcharakterisierung des verwendeten optisch parametrischen Oszillators als auch für die Kontrolle und Verifikation der mit dem SLM erzeugten Phasenverteilungen eingesetzt werden soll. Für den Wellenfrontensensor ist eine Kombination basierend auf einem Standard Silizium CMOS-Chip und einer SHG-Einheit vorgesehen. Auf diese Weise soll der Einsatz von MIR-Flächendetektoren mit ihrer für eine Wellenfrontanalyse bei hoher Ortsauflösung unzureichenden Charakteristik vermieden werden.

The aim of the IFNANO subproject is the construction of a Hartmann-Shack wavefront sensor for pulsed sources in the MIR spectral range, which shall be utilized within the project both for the beam characterization of the applied optical parametric oscillator as well as for the control and verification of the phase distributions generated with the SLM. A combination based on a standard silicon CMOS chip and a SHG unit is provided for the wave front sensor. In this way, the use of MIR area detectors with their inadequate characteristics for wave front analysis with high spatial resolution shall be avoided.

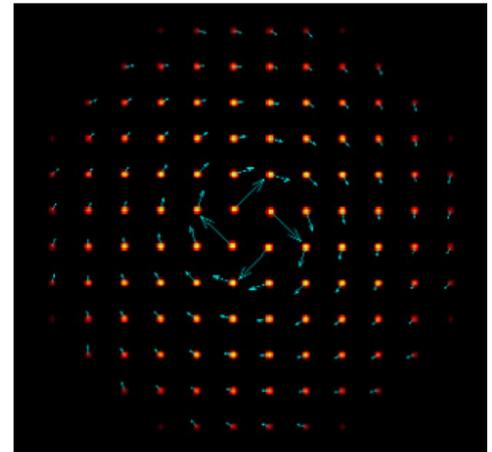
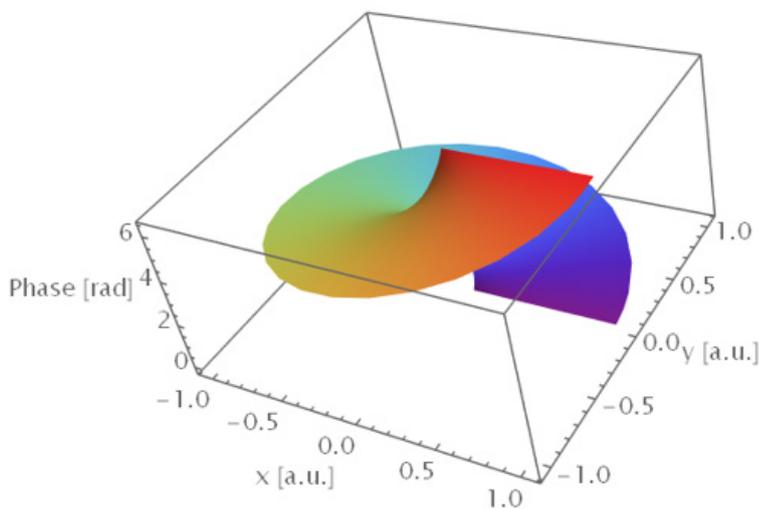


Abbildung 2: (links) Phasenvortex der topologischen Ladung +1 (in Einheiten von $\lambda/2\pi$) und zugehörige Hartmann-Shack-Spotverteilung (rechts) eines Flattop-Strahls bei einer Wellenlänge von 2100 nm für ein Mikrolinsenarray mit 4 mm Brennweite und 0,3 mm Pitch. Die Verschiebungen der einzelnen Spots gegen eine ebene Referenzwelle sind als grüne Pfeile eingetragen. Die Singularität im Zentrum ist deutlich sichtbar.

Figure 2: (left) Phase vortex of topological charge +1 (in units of $\lambda/2\pi$) and corresponding Hartmann-Shack spot pattern (right) at a wavelength of 2100 nm for a microlens array with 4 mm focal length and 0.3 mm pitch. The displacement the spots against a plane wave reference position is indicated by green arrows. The singularity at the center is clearly resolved.

Optik / Kurze Wellenlängen Optics / Short Wavelengths

Propagation teilkohärenter FEL-Strahlung unter Einsatz von Wellenfrontdaten und Kohärenz-Modellen

Als Fouriertransformierte der Kohärenzfunktion beinhalten Phasenraumverteilungen wie die Wigner-Verteilung oder die Ambiguitätsfunktion, deren Messung in Zusammenarbeit mit DESY / Hamburg in den Jahren 2018 - 2020 realisiert wurde, die volle Beschreibung des Propagationsverhaltens eines Strahls. Allerdings ist die Berechnung der entsprechenden 4D-Integrale äußerst aufwendig und kommt daher für Echtzeit-Anwendungen z.B. während der FEL-Beamline Justage oder für die Einstellung einer nutzerspezifischen Intensitätsverteilung im Fokus nicht in Frage.

Propagation of partially coherent FEL-radiation from Hartmann wave front measurements and coherence model functions

As Fourier transforms of the coherence function, phase space distributions such as the Wigner distribution, the measurement of which was carried out in cooperation with DESY / Hamburg from 2018 - 2020, contain the full description of the propagation behavior of a beam. However, the calculation of the corresponding 4D integrals is extremely complex and is therefore out of question for real-time applications e.g. during the FEL beamline adjustment or for setting a user-specific intensity distribution in the focus.

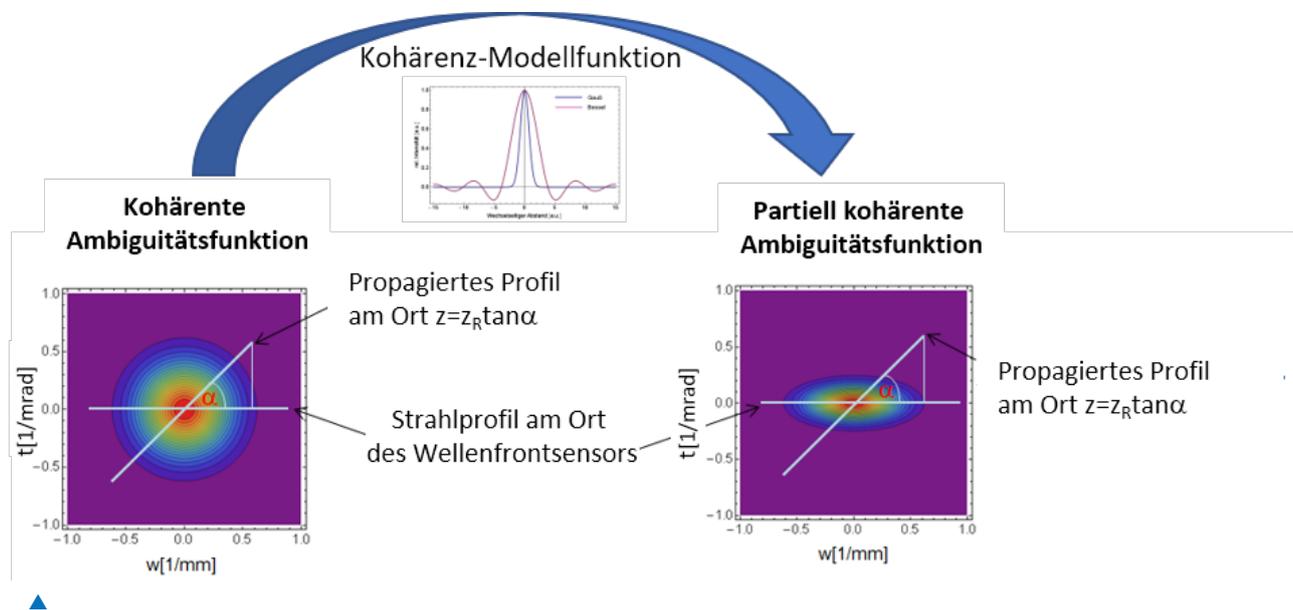


Abbildung 1: Prinzip der Propagation partiell kohärenter Strahlen. Die Fourier-Transformierte (FT) der mit Hilfe von Wellenfrontdaten an den Ort z propagierten kohärenten Verteilung entspricht einem α -Schnitt durch die kohärente Ambiguitätsfunktion A bei $z = 0$. Multiplikation von A mit der Kohärenz-Modellfunktion ergibt die FT der gesuchten Intensitätsverteilung in gleicher Weise als α -Schnitt der modifizierten A -Funktion.

Figure 1: Principle of partially coherent beam propagation. The Fourier transform (FT) of the coherent distribution propagated to location z by using wave front data corresponds to an α -cut through the coherent ambiguity function A at $z = 0$. Multiplication of A with the coherence model function results in the FT of the intensity distribution sought in the same way as an α -cut of the modified A -function.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Im Rahmen des BMBF-Verbundvorhabens PRO-WAVE wurde daher ein Verfahren zur effizienten numerischen Propagation der partiell kohärenten FEL-Strahlung am Freie-Elektronen-Laser FLASH entwickelt (siehe Abb. 1). Die Vorgehensweise basiert auf der Annahme der Quasihomogenität und verwendet die Messdaten eines Hartmann-Wellenfrontsensors in Kombination mit Kohärenz-Modellverteilungen von Gauß- bzw. Bessel-Typ, deren Parameter mit Hilfe von Young-Experimenten und durch Vergleich mit PMMA-Einbränden bestimmt werden. Insgesamt ergibt sich für einen geeigneten Parametersatz eine hervorragende Übereinstimmung mit den PMMA-Daten. Die Veröffentlichung der entsprechenden Ergebnisse ist für 2022 vorgesehen. Im Laufe des Jahres 2021 wurde das Verfahren auf allgemeine Kohärenzmodelle erweitert.

Therefore, a method for the efficient numerical propagation of the partially coherent FEL radiation at the free-electron laser FLASH2 was developed within the framework of the BMBF project PROWAVE (see Fig. 1). The procedure is based on the assumption of quasi-homogeneity and uses the output of a Hartmann wave front sensor in combination with coherence model distributions of Gauss or Bessel type, the parameters of which are determined with the help of Young experiments and by comparison with PMMA imprints. Overall, there is excellent agreement with the PMMA data for a suitable parameter set (results to be published in 2022). During 2021, the procedure was extended to general quasi-homogeneous coherence models.

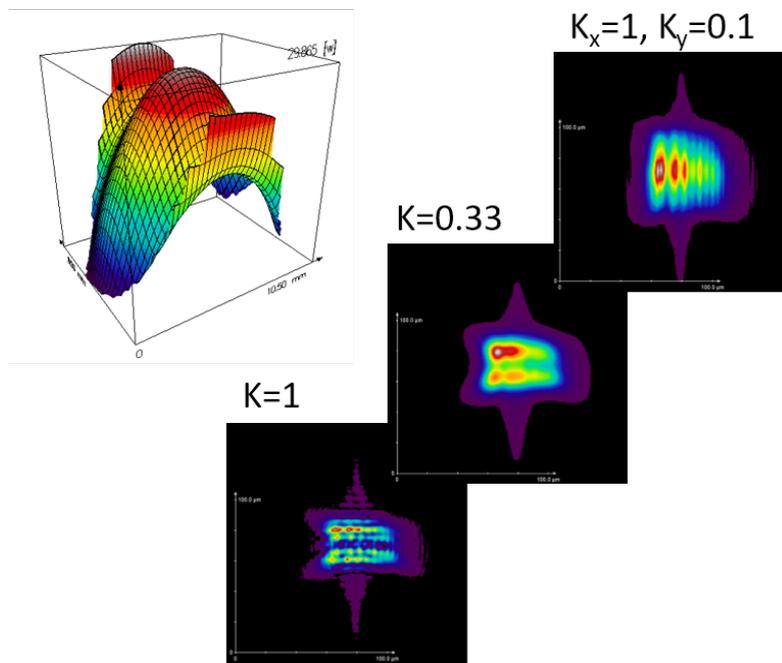


Abbildung 2: Wellenfrontaberrationen (links oben) des FEL-Strahls am FLASH2 und daraus numerisch berechnete Intensitätsverteilung in Fokussnähe (rechte Seite) für verschiedene Werte des globalen Kohärenzgrades K bzw. K_x und K_y unter Annahme von Bessel-Korrelationen in der Sensorebene.

Figure 2: Wave front aberrations (upper left) of the FEL beam at FLASH2 and numerically propagated intensity distributions near the focus (right side) for Bessel correlations and different values of the global degree of coherence K or K_x and K_y , respectively.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Kompakte Laborquellen für weiche Röntgen- und EUV-Strahlung

Weiche Röntgen- und EUV-Strahlung ermöglichen eine Vielzahl anwendungsbezogener Forschungsaktivitäten: So wird Strahlung bei $\lambda = 13,5$ nm u.a. in der EUV-Halbleiterlithographie zur Fertigung von mikroelektronischen Schaltkreisen genutzt. Gepulste Röntgenstrahlung wird zum Beispiel für innovative Anwendungen benötigt, die von der strukturellen Analytik in der Biologie und den Lebenswissenschaften bis hin zur Untersuchung von Wechselwirkungsmechanismen mit Materie reichen.

Am IFNANO werden auf Basis laserinduzierter Plasmen diverse kompakte Quellen für weiche Röntgen- und EUV-Strahlung im Spektralbereich von 1 bis 20 nm betrieben. Die Plasmaquellen nutzen einen gepulsten Gasstrahl als Lasertarget, der im Gegensatz zu anderen Targets (z.B. Festkörper, Flüssigkeiten) einen langzeitstabilen und sauberen Betrieb bei äußerst kompakter Bauweise ermöglicht.

Laboratory-scale soft X-ray and EUV radiation sources

EUV and soft X-ray radiation form the basis for a variety of applied research activities: radiation at $\lambda = 13.5$ nm is used in EUV semiconductor lithography for the production of microelectronic circuits. Pulsed X-rays are employed for many innovative applications ranging from structural analysis in biology and the life sciences to the investigation of fundamental mechanisms of interaction with matter.

The plasma sources operated at IFNANO make use of a pulsed gas jet as the laser target, which allows, in contrast to other targets (solids, liquids), a long-term, stable, and clean operation in an extremely compact design.

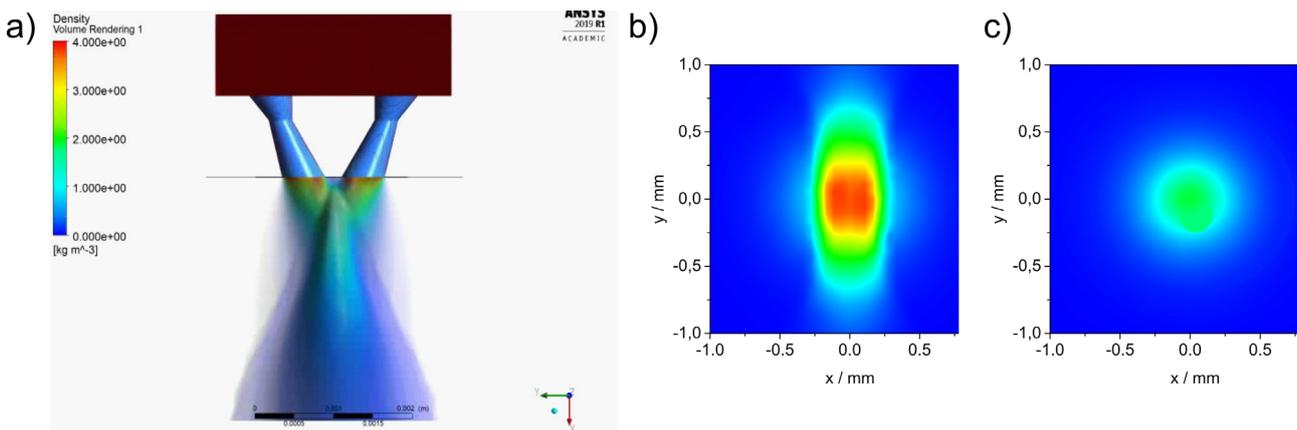


Abbildung 1: a) 3D-Simulation der Gasverteilung bei der Doppeldüse. b), c) 2D-Querschnitt der Dichteverteilung 1 mm unter der Düsenöffnung für die Doppeldüse (b) und Einzeldüse (c). Die Dichteverteilung des Gases ist bedeutend höher bei der Doppeldüse.

Figure 1: a) 3D-simulation of the gas density distribution. b), c) 2D-simulation of the gas density 1 mm below the nozzle for the new (b) and old (c) nozzle. The gas density of the new nozzle is significantly higher.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Die Brillanz der Quelle wurde im letzten Jahr durch eine optimierte Düsengeometrie (siehe Skizze zum Düsendesign) um einen Faktor 3 verbessert, indem zwei konische Düsenöffnungen in einem Winkel von 45° zueinander zur Formung eines Gasstrahls höherer Dichte verwendet wurden (siehe Abb. 1). Zusätzlich wurde der Winkel des Lasereinfalls von 90° auf 20° optimiert.

Darauf aufbauend wurde ein Labormesssystem für EUV-Strahlung entwickelt, das u.a. für Ablationsexperimente (siehe Fokusprofil und Ablation PMMA), aber auch für Metrologie zum Beispiel zur Qualifizierung von EUV-Sensoren geeignet ist. Zudem wurde unter Nutzung des optimierten Düsendesigns ein Xenonspektrum hinter einem Zirkonfilter aufgenommen (siehe Abb. 2). Die Intensität der 13,5 nm Linie konnte um einen Faktor 2 erhöht werden.

Due to an optimized nozzle design (see sketch of nozzle design), the brilliance of the source could be increased by a factor of three within the last year by using two conical nozzle openings that are tilted by 45° to each other to form a gas jet with higher density (see Fig. 1). Additionally, the angle of incidence for the laser beam was optimized from 20° to 90°.

On this basis, a laboratory-scale EUV system was developed that is suitable for ablation experiments (see focal spot size and ablation imprint PMMA) and also for metrology applications, for example, for the qualification of EUV sensors. Furthermore, using the optimized nozzle design, a xenon spectrum was observed behind a zirconium filter (see Fig. 2). The intensity of the 13.5 nm line was increased by a factor of two.

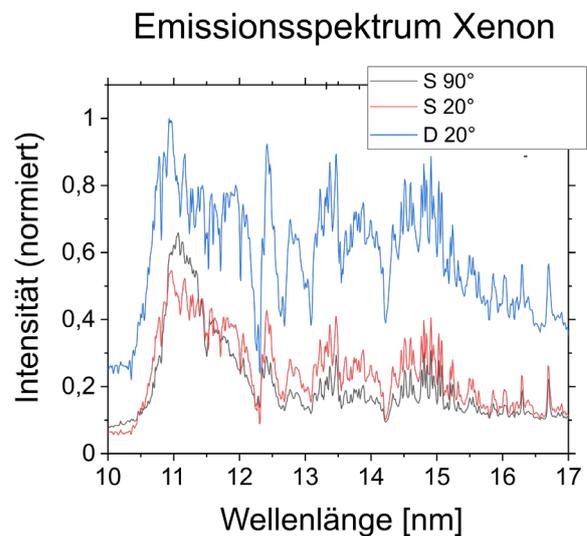
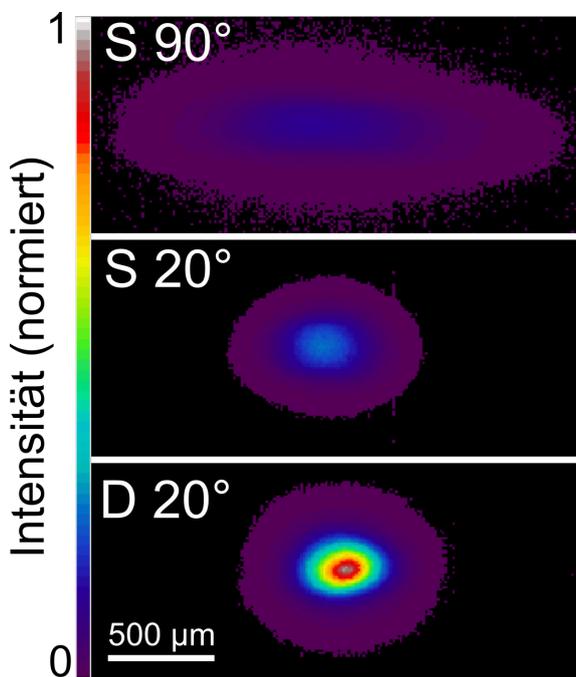


Abbildung 2: links: Aufnahme des Plasmas mit einer Pinholekamera. Im Vergleich der Einzeldüse (S) zur Doppeldüse (D) erhöht sich die Plasmaintensität signifikant. Rechts: Normierte Xenon-Emissionsspektren im EUV-Bereich. Die Intensität des gesamten Spektrums bei der Doppeldüse ist deutlich stärker.

Figure 2: Left: Capture of the plasma by a pinhole camera. The change from the old nozzle (S) to the new nozzle (D) increased the intensity of the plasma significantly. Right: Normalized xenon emission spectra in the EUV spectral range. The intensity of the spectrum for the new nozzle is significantly higher.

Optik / Kurze Wellenlängen Optics / Short Wavelengths

Röntgenabsorptionsspektroskopie (NEXAFS)

Auf Basis einer kompakten Laborquelle wurde ein hochauflösendes Labormesssystem zur Röntgenabsorptionsspektroskopie (NEXAFS = Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) für den Wellenlängenbereich $\lambda = 1 - 5$ nm entwickelt (siehe Abb. 1). Als Strahlquelle wird ein breitbandig emittierendes laserinduziertes Krypton-Plasma genutzt. Dünne Proben lassen sich in Transmission an verschiedenen Absorptionskanten elementspezifisch untersuchen (z.B. C, N, O, Ca, Ti, Mn, Fe, Ni, Cu).

X-ray absorption spectroscopy (NEXAFS)

Based on a compact soft X-ray source, a high-resolution table-top system for X-ray absorption spectroscopy (NEXAFS = Near Edge X-ray Absorption Fine Structure) was developed for the wavelength range of $\lambda = 1 - 5$ nm (see Fig. 1). A broadband emitting laser-induced krypton plasma is used as a beam source. Thin samples can be measured in transmission and investigated element-specifically at different absorption edges (e.g. C, N, O, Ca, Ti, Mn, Fe, Ni, Cu).

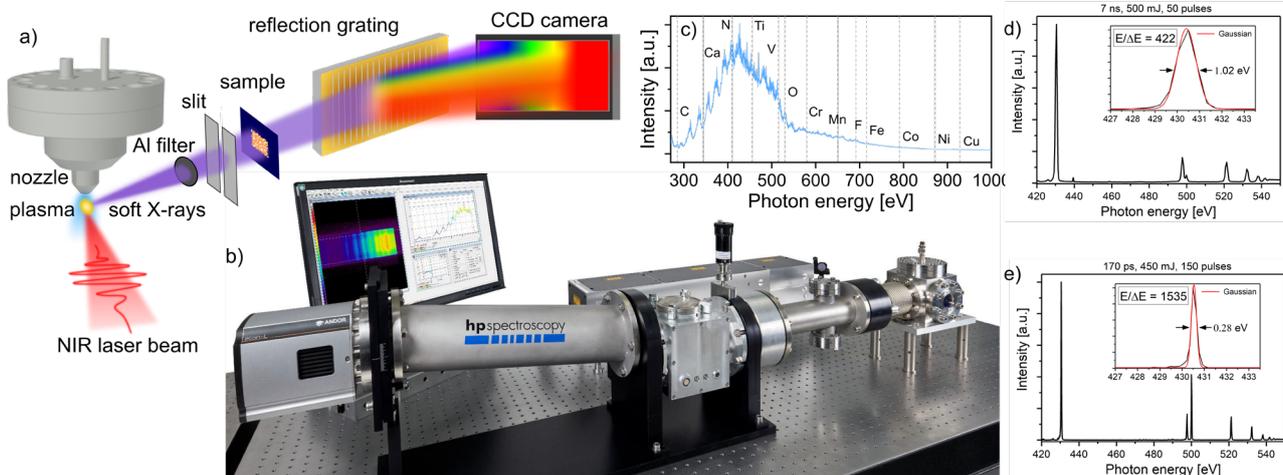


Abbildung 1: (a) schematisches Prinzip des Röntgenabsorptionsspektrometers und (b) Foto des kommerzialisierten Systems, welches im ZIM-Projekt ELARA entwickelt wurde. (c) zeigt das erzeugte Krypton Emissionsspektrum mit ausgewählten Absorptionskanten in diesem Spektralbereich. Die spektrale Auflösung des Laborsystems wird durch die Stickstoff-Emissionslinie bei $\lambda = 2,88$ nm für den alten (d) sowie den neuen, hochauflösenden Aufbau (e) bestimmt.

Figure 1: (a) schematic principle of the X-ray absorption spectrometer and (b) photograph of the commercialized system, developed as part of the ZIM project ELARA. (c) shows the generated krypton emission spectra. The spectral resolution of the laboratory system is determined by the emission line of nitrogen at $\lambda = 2,88$ nm for (d) the previous and (e) new high-resolution setup.

Optik / Kurze Wellenlängen

Optics / Short Wavelengths

Die Feinstruktur an den Absorptionskanten enthält qualitative sowie quantitative Informationen über Bindungszustände der Probe und kann daher für die chemische Analyse genutzt werden. Die Proben können dabei entweder im Vakuum oder an einer eigens für das kompakte Spektrometer entwickelten Helium-Probenkammer unter Atmosphärendruck untersucht werden. Im Rahmen des DFG-Projekts NEXAFS konnte die Auflösung des Spektrometers über einen Faktor 3 gesteigert werden, so dass nun mit dem kompakten Laborsystem Spektren in vergleichbarer Qualität zu Messungen am Synchrotron durchgeführt werden können (siehe Abb. 2).

The fine structure at the absorption edges contains information about bonding states of the absorbing sample and can therefore be used for chemical analysis. The samples can be analysed either in a vacuum or at atmospheric pressure on a specially developed helium sample chamber for the compact spectrometer. Within the DFG NEXAFS project, the resolution of this spectrometer was increased by a factor of more than 3, so that spectral investigations of comparable quality to measurements at the synchrotron can now be performed with our table-top setup (see Fig. 2).

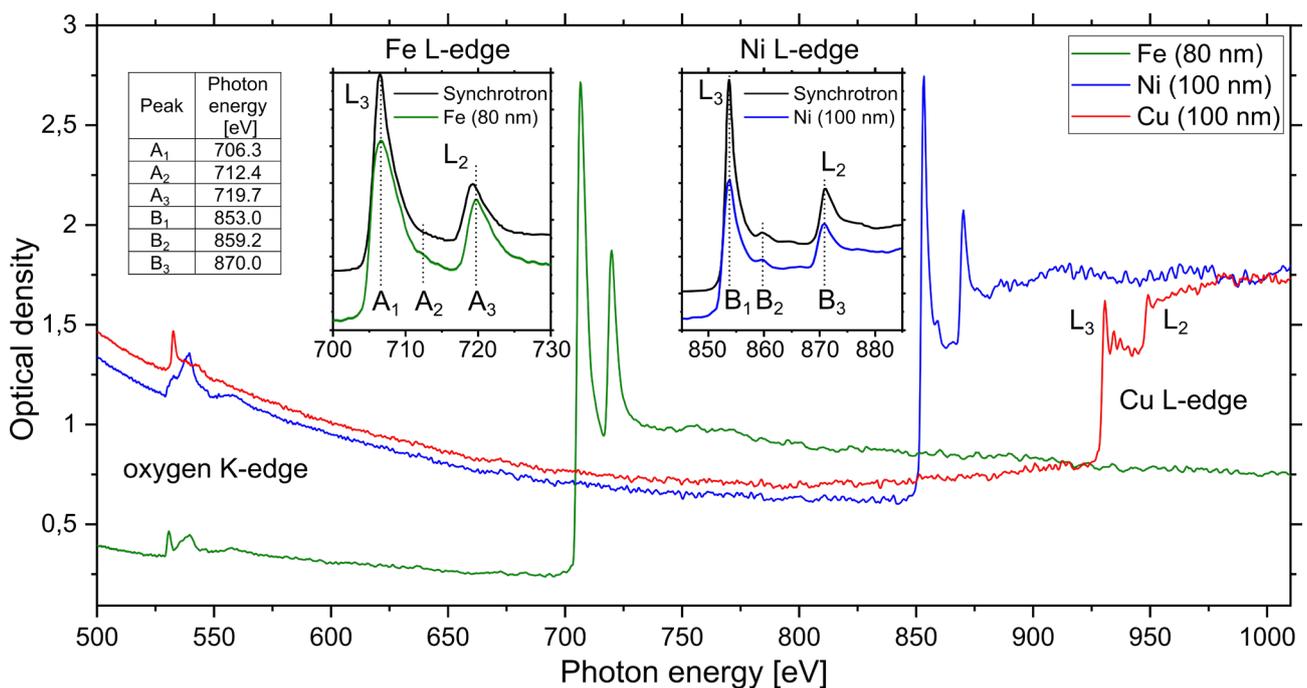


Abbildung 2: Röntgenabsorptionsspektren für dünne Fe-, Ni- und Cu-Schichten auf Si_3N_4 -Membranen, untersucht an ihren L-Absorptionskanten und an der Sauerstoff-K-Kante (akkumuliert über 750 Pulse). Zum Vergleich sind Messungen am Synchrotron dargestellt, welche die Gesamtelektronenausbeute von Eisen und Nickel zeigen. Es ist eine sehr gute Übereinstimmung festzustellen.

Figure 2: X-ray absorption spectra for thin Fe, Ni and Cu films on Si_3N_4 membranes, investigated at their L-absorption edges and at the oxygen K-edge (accumulated over 750 pulses). For comparison, synchrotron data are displayed showing the total electron yield of iron and nickel (redrawn from Giménez-Marqués et al., *Small* 14(40), 1801900 (2018) and Chang et al., *J. Appl. Phys.* 87(3), 1312-1317 (2000), respectively). The measured data is in very good agreement with the synchrotron data.

Berichte aus der Abteilung Departmental Reports

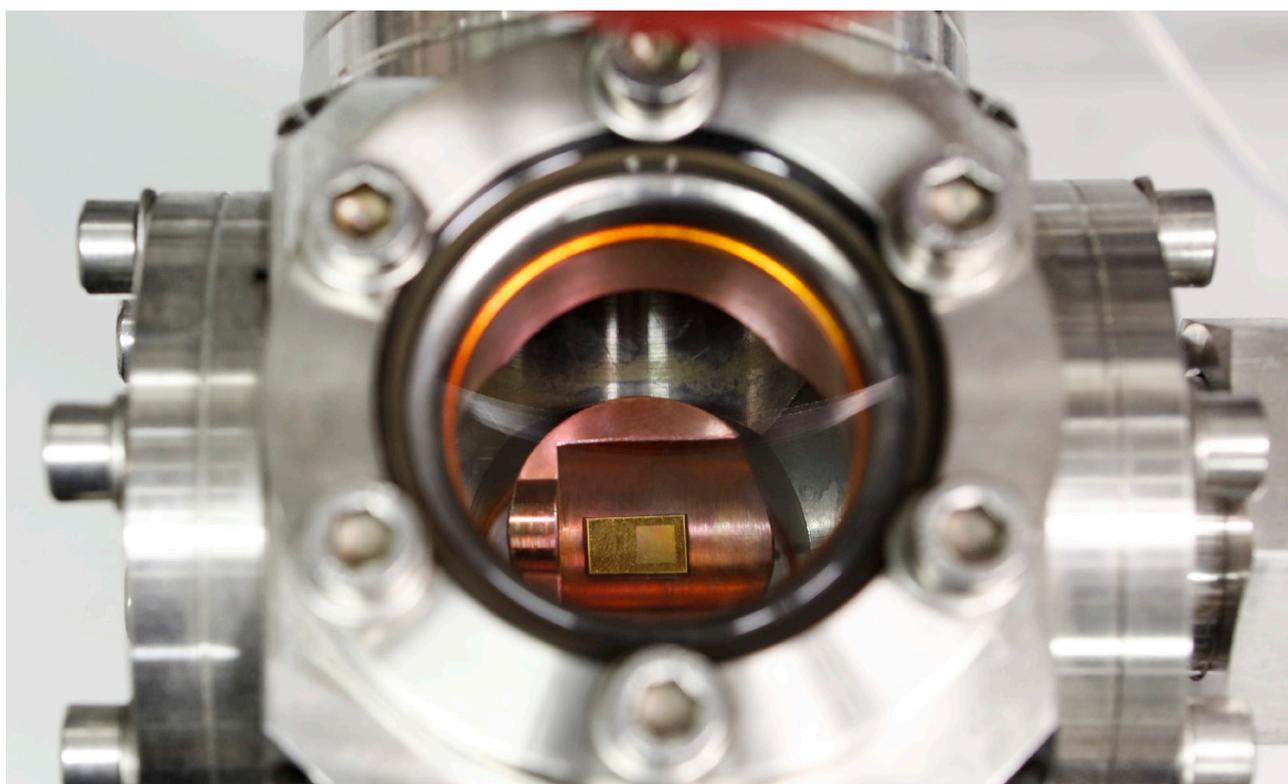


Dr. Hainer Wackerbarth
Abteilungsleiter

T +49 551/5035-58
F +49 551/5035-99
M hainer.wackerbarth@ifnano.de

MITARBEITENDE / STAFF MEMBERS

Dr. Yamen AlSalka	Dr. Georgios Ctistis	Christian Grünewald	Jasmin Grünewald
Tim Kutz	Yuwen Peng	Dr. Christoph Lenth	Jan Lukas Langer
Oliver Nettelmann	Stefan Scholz	Pascal Schröder	Dr. Sven Schwabe
Fabian Müller	Felix Müller	Christian Niklas	Florian Wieduwilt



Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Die Abteilung erforscht und entwickelt neuartige sensorische Messverfahren. Diese basieren überwiegend auf Ramanstreuung, Fluoreszenz, IR-Absorption, laserinduzierter Plasmaspektroskopie, Fotometrie sowie Ionenmobilitätsspektrometrie. Zudem werden sie häufig mit spezifischen Probenvorbereitungsverfahren und chemometrischen Methoden kombiniert.

Die Stärken dieser Sensorverfahren liegen in den zerstörungsfreien, berührungslosen sowie schnellen Messungen. Weiterhin ermöglichen sie die Analyse von Elementen, Substanzen, Strukturen sowie komplexen Matrices und biologischen Systemen. Durch neue Kombinationen von den optischen Methoden mit der Mikrofluidik, der Nanotechnologie oder der Chemometrie ergibt sich ein sehr hohes Potenzial für innovative Anwendungen, insbesondere in den Arbeitsfeldern Umweltanalytik, Vor-Ort-Analytik, Bioanalytik und Prozessanalytik.

Im Bereich der Umweltanalytik werden Sensoren entwickelt für die Detektion von konventionellen und chemischen Kampfstoffen auf der Basis von Fluoreszenzemission und Ionenmobilitätsspektrometrie. Mit diesen Sensoren sollen Taucher direkt im Einsatz vor TNT und Senfgas in Ost- und Nordsee gewarnt werden.

Im Bereich der Prozessanalytik werden in der Herstellung von Kautschukprodukten Ramanstreuung, IR-Absorption und Fotometrie genutzt, um die Rohstoffqualität zu überwachen. Die komplexe Matrix der Gummiprodukte hingegen wird mittels laserinduzierter Plasmaspektroskopie untersucht. Mittels Datenfusion und Digitalisierung wird die Produktion online optimiert und erhöht so die Reproduzierbarkeit der Produktqualität.

Neben der Erfassung der Daten bildet die Erforschung der automatisierten Datenauswertung bei komplexeren Informationen einen weiteren Schwerpunkt. Als Beispiele sind hier die Überwachung der Raumluft und Lithium-Ionen-Akkus mittels unterschiedlicher Gassensoren zu nennen.

The department researches and develops novel sensory measurement methods. These are mainly based on Raman scattering, fluorescence, IR absorption, laser-induced breakdown spectroscopy, photometry, and ion-mobility spectrometry. In addition, these methods are often combined with specific sample preparation procedures and chemometric analysis methods.

The strengths of these sensory methods lie in the nondestructive, noncontact, and fast measurements. Furthermore, they enable the analysis of elements, substances, structures, and complex matrices and biological systems. New combinations of these optical methods with microfluidics, nanotechnology, or chemometrics have very high potential for innovative applications, especially in the fields of environmental analysis, on-site analysis, bioanalysis, and process analysis.

In the field of environmental analysis, sensors are developed for the detection of conventional and chemical warfare agents on the basis of fluorescence emission and ion-mobility spectrometry. With these sensors, divers should be warned of TNT and mustard gas in the Baltic and North seas while they are on duty.

In the field of process analysis, on one hand, Raman scattering, IR absorption, and photometry are used in the manufacture of rubber products in order to monitor the quality of the raw materials. The complex matrix of rubber products, on the other hand, is examined using laser-induced breakdown spectroscopy. By means of data fusion and digitization, production is optimized online, thus increasing the reproducibility of product quality.

In addition to the collection of data, research into automated data evaluation for more complex information is another focus of the department. Examples here are the monitoring of the room air quality and lithium-ion batteries using different gas sensors.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Entwicklung von Sensoren für die Detektion von konventionellen und chemischen Kampfstoffen zur sicheren Unterwasserarbeit in Ost- und Nordsee

Selbst 75 Jahre nach Ende des Zweiten Weltkriegs liegen noch immer Unmengen an Munition (davon rund 220.000 Tonnen chemische Kampfmittel) in Nord- und Ostsee. Durch die lange Zeit im Wasser sind die metallischen Hüllen stark korrodiert, so dass die konventionellen und chemischen Kampfmittel, z.B. TNT und Senfgas, langsam in das Wasser austreten. Dadurch gelangen gefährliche Substanzen zunehmend in die Wassersäule und den Meeresboden. Eine Gefahr nicht nur für die Umwelt, sondern im besonderen Maße für die Bergungstaucher, die aufgrund der intensiveren Nutzung des Meeres (Off-Shore-Windkraftanlagen, Pipelines) benötigt werden. Im Projekt entwickeln wir Messensoren, die kontinuierlich die schädlichen Substanzen in der Umgebung der Weltkriegsmunitionslagerstätten monitoren, um ein Arbeitsschutzsystem für Taucher zu erschaffen, das es erlaubt, die Weltkriegsmunition aus Nord- und Ostsee sicher zu bergen.



▲
Warnung der Taucher vor Gefahren beim Umgang mit Munition.
Warning divers of danger when handling ammunition

Development of sensors for the detection of conventional and chemical warfare agents for safe underwater work in the Baltic and North seas

Even 75 years after the end of World War II, there are still huge amounts of ammunition (around 220,000 tons of which are chemical weapons) in the North and Baltic seas. Due to being in the water for so long, the metallic shells are badly corroded so that the conventional and chemical warfare agents, e.g. TNT and mustard gas, slowly escape into the water. As a result, dangerous substances are increasingly finding their way into the water column and the sea floor. A danger not only for the environment but especially for salvage divers, who are needed due to more intensive use of the sea (off-shore wind turbines, pipelines) In this project, we are developing measurement sensors that continuously monitor the harmful substances in the vicinity of the World War I ammunition storage sites in order to create an occupational health and safety system for divers that allows them to safely recover World War I and II ammunition from the North and Baltic seas.



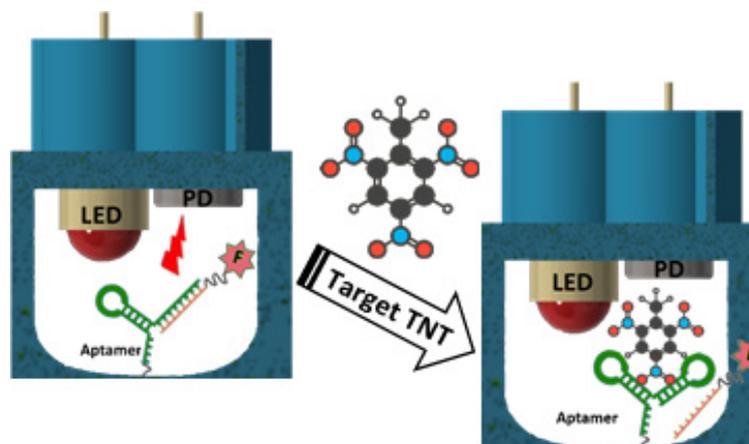
▲
Unterwasseraufnahme einer Munitionslagerstätte.
Underwater picture of an ammunition dump.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

In dem Projekt werden zwei Sensoren entwickelt. Zum einen forschen wir an einem portablen mikrofluidischen TNT-Sensor als Unterwasser-Schnelltest auf TNT und dessen Derivate. Zum anderen wird ein Senfgasdetektor auf der Basis der Ionemobilitätsspektrometrie für den Meeresboden entwickelt. Der TNT-Sensor basiert auf Lab-On-A-Chip-Technologie und soll am Taucheranzug getragen oder an einem ferngesteuerten Unterwasserfahrzeug montiert werden. Die Abteilung Photonische Sensorik entwickelt dabei den mikrofluidischen Chip und die optische Detektionseinheit für den TNT-Sensor. Basierend auf dem Effekt der Fluoreszenzlöschung spezieller Fangreagenzien, wird die TNT-Konzentration im Wasser somit nahezu in Echtzeit überwacht. Der eigentliche TNT-Nachweis erfolgt über spezifische Aptamere, die mit Fluorophoren markiert und auf dem Chip fixiert sind und von unserem Projektpartner miprolab bereitgestellt werden. Das Chipdesign und die optische Detektion sollen dabei auch die harschen Bedingungen unter Wasser (Druck, Temperatur, Salzgehalt) berücksichtigen und es ermöglichen Konzentrationen im ng/ml-Bereich zu detektieren und trotz allem den Chip tragbar und batteriebetrieben zu machen.

Two sensors are being developed as part of the project. For the first, we are researching a portable microfluidic TNT sensor as an underwater rapid test for TNT and its derivatives. For the second, a mustard gas detector based on ion-mobility spectrometry is being developed for the sea floor. The TNT sensor is based on Lab-On-A-Chip technology and should be worn on the diving suit or mounted on a remotely operated underwater vehicle. The Photonic Sensor Technology department is developing the microfluidic chip and the optical detection unit for the TNT sensor. Based on the fluorescence quenching effect of special capture reagents, the TNT concentration in the water is monitored almost in real time. The actual TNT detection takes place via specific aptamers, which are marked with fluorophores and fixed on the chip and are provided by our project partner miprolab. The chip design and the optical detection should also take into account the harsh conditions underwater (pressure, temperature, salinity) and make it possible to detect concentrations in the ng/ml range and, despite everything, make the chip portable and battery operated.



▲ Fluoreszenzbasierter Chipsensor zur Bestimmung der TNT-Konzentration unter Wasser.
Fluorescence-based chip sensor for the measurement of the TNT concentration underwater.

Photonische Sensorik Photonic Sensor Technologies

Photonische Sensorik für die Digitalisierung der Kautschukverarbeitung

Die Kautschukverarbeitung ist ein hochkomplexer Prozess, bei dem die Produktqualität von vielen Prozessparametern sowie der wechselnden Rohstoffqualität abhängt. Damit eignet sich dieses Arbeitsumfeld ideal zur Anwendung von Techniken des maschinellen Lernens. Dabei werden diverse sensorische Daten gesammelt und mit den Produkteigenschaften korreliert. Dies erlaubt anschließend Vorhersagen über die Produktqualität aus einem „Digitalen Zwilling“, der aus Messungen der Rohstoffeigenschaften erzeugt wird. Ziel ist die Anpassung von Prozessparametern und die Qualitätssicherung.

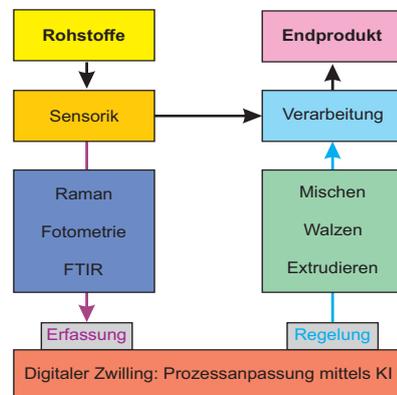
Dazu müssen die verwendeten Rohstoffe möglichst genau charakterisiert werden. Häufig werden Naturkautschuke verwendet, deren Zusammensetzung und Begleitstoffanteile natürlichen Schwankungen unterliegen. Am IFNANO wird eine breite Palette von Kautschukrohstoffen untersucht, darunter Naturkautschuk, Kautschuk auf Nitril-Butadien-Basis und Kautschuk auf Ethylen-Propylen-Dien-Basis (EPDM). Für diesen Zweck, werden diverse photonische Verfahren eingesetzt, um diese Rohstoffe umfassend zu charakterisieren.



Foto eines gewalzten Kautschukproduktes nach dem Extrudieren.
Photo of a rolled rubber product after extrusion.

Photonic sensors for digitization in the rubber industry

Rubber processing is a highly complex process in which the product quality depends on many process parameters as well as the changing quality of the raw materials. This work environment is therefore ideally suited for the application of machine learning techniques. Various sensory data are collected and correlated with the product properties. This allows predictions about the product quality from a "digital twin", which is generated from measurements of the raw material properties. The aim is the adjustment of process parameters and quality assurance. For this purpose, the raw materials used must be characterized as precisely as possible. Natural rubbers are often used, the composition and proportions of which are subject to natural fluctuations. A wide range of rubber raw materials is examined at IFNANO, including natural rubber, rubber based on nitrile butadiene, and rubber based on ethylene propylene diene (EPDM). For this purpose, various photonic processes are used to comprehensively characterize these raw materials. This includes the techniques of Raman and infrared spectroscopy (ATR-FTIR), in which each method provides complementary information about the molecular vibrations:



Schematische Darstellung der automatisierten Prozesskontrolle durch das Konzept des digitalen Zwillings.
Schematic representation of the automated process control through the concept of the digital twin.

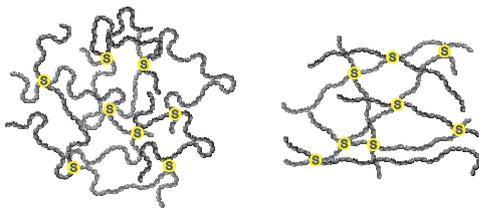
Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Dies umfasst die Techniken Raman- und Infrarotspektroskopie (ATR-FTIR), welche jeweils komplementäre Informationen über die Schwingungen in Molekülen liefern: das Kohlenstoffgerüst der Polymere oder die polaren Komponenten in den Seitenketten. Fotografische Messungen dienen der Erfassung von makroskopischen Verunreinigungen, Einschlüssen oder verschiedenen Phasen. Am Kautschukprodukt wird LIBS (Laser Induced Breakdown Spectroscopy) eingesetzt, um die Mischungsgüte nach dem Extrudieren zu überwachen. Dabei wird die Konzentration von Zink erfasst, welches aus dem Vulkanisationsaktivator ZnO stammt und die Vernetzung der Polymerketten steuert.

Der Kooperationspartner Deutsches Institut für Kautschuktechnologie e.V. sorgt zusätzlich für makroskopische Sensordaten wie Viskosität, Zugfestigkeit oder Schmelzpunkt des Produktes. Auch Prozessparameter wie Temperatur und Druck während der Verarbeitung werden erfasst. All diese Sensordaten werden einer Datenreduktion unterzogen und anschließend mit den Produkteigenschaften korreliert, um ein neuronales Netz zu trainieren.

Schlussendlich kann aus reinen optischen Daten ein digitaler Zwilling der Rohstoffmischung erzeugt werden, welcher die Anpassung der Prozessparameter erlaubt, um die optimale Produktqualität zu erreichen. Dieses Vorhaben ist Teil der Plattform MaterialDigital, der eine besondere strategische Bedeutung für den Wirtschaftsstandort Deutschland bei der Digitalisierung von Materialien zukommt.

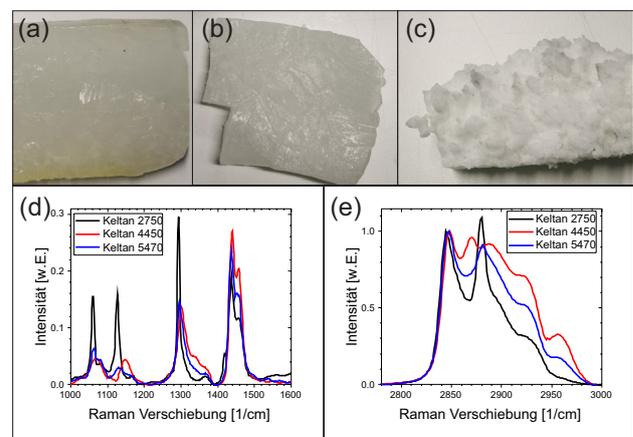


Schematische Darstellung des Effekts der Schwefelverknüpfungen auf die Stabilität von Kautschukelastomeren. Mechanische Zugkräfte werden unter den Polymermolekülen übertragen und verteilt.

Schematic representation of the effect of sulfur linkages on the stability of rubber elastomers. Mechanical tensile forces are transmitted and distributed among the polymer molecules.

the carbon structure of the polymers or the polar components in the side chains. Photographic measurements are used to record macroscopic impurities, inclusions, or different phases. Laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS) is used on the rubber product to monitor the mixing quality after extrusion. The concentration of zinc is recorded, which comes from the vulcanization activator ZnO and controls the cross-linking of the polymer chains.

The cooperation partner German Institute for Rubber Technology also provides macroscopic sensor data such as the viscosity, tensile strength, or melting point of the product. Process parameters such as temperature and pressure during processing are also recorded. All of these sensor data are subjected to data reduction and then correlated with the product properties in order to train a neural network. Ultimately, a digital twin of the raw material mixture can be generated from pure optical data, which allows the process parameters to be adjusted in order to achieve the best possible product quality. This project is part of the MaterialDigital platform, which is of particular strategic importance for Germany as a business location when it comes to the digitization of materials.



Fotos ausgewählter Kautschukproben: (a) Keltan 2750, (b) Keltan 4450 und (c) Keltan 5470. Raman-Spektren der gezeigten Proben (d und e), welche die eindeutige Unterscheidung der Proben und Quantifizierung ihrer chemischen Molekülteile demonstrieren.

Photonische Sensorik

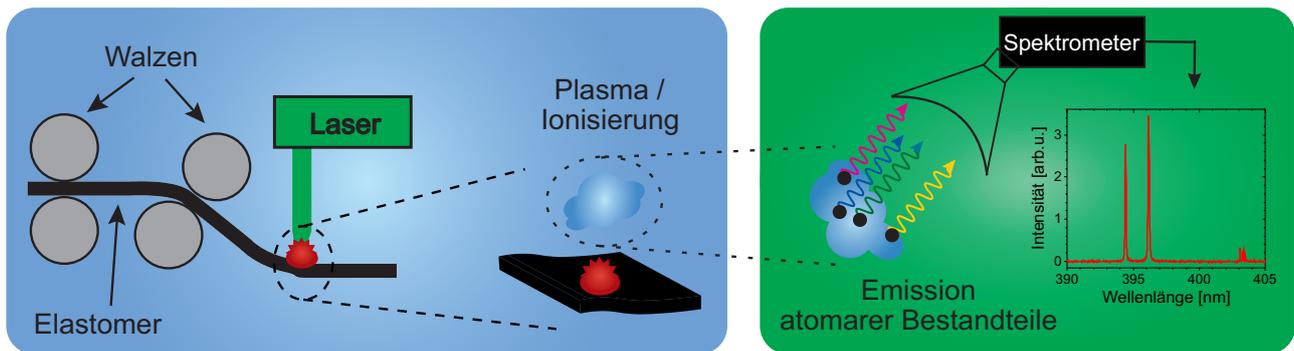
Photonic Sensor Technologies

Quantitative Bestimmung der Verteilungsgüte von Vernetzungschemikalien in Kautschukmischungen

Bei der Herstellung von Kautschukelastomeren ist die Vernetzung bzw. Vulkanisation ein entscheidender Schritt. Die Anzahl und Verteilung der Verknüpfungen der Polymerketten untereinander bestimmt die physikalischen Eigenschaften des Produktes, wie z.B. die Zugfestigkeit. Die Dichte und Homogenität dieser Verknüpfungen kann im Herstellungsprozess gezielt beeinflusst werden über die Verteilung und Konzentration von Vernetzungschemikalien wie Schwefel oder Zinkoxid. Dabei bestimmt die Mischdauer aller Komponenten vor der Extrusion die Homogenität des finalen Produktes. Zur Qualitätskontrolle und Prozesssteuerung muss daher die Verteilungsgüte dieser Vernetzungschemikalien bestimmt werden. Leider absorbieren sowohl die Kautschukmischung als auch das fertige Produkt sehr stark Licht und sind damit vielen etablierten spektroskopischen Methoden nicht zugänglich.

Quantitative determination of the distribution quality of crosslinking chemicals in rubber compounds

Cross-linking or vulcanization is a crucial step in the production of rubber elastomers. The number and distribution of the links between the polymer chains determine the physical properties of the product, such as tensile strength. The density and homogeneity of these links can be specifically influenced in the manufacturing process via the distribution and concentration of cross-linking chemicals such as sulfur or zinc oxide. The mixing time of all components before extrusion determines the homogeneity of the final product. The distribution quality of these crosslinking chemicals must therefore be determined for quality control and process control. Unfortunately, both the rubber mixture and the finished product absorb light very strongly and are therefore not accessible to many established spectroscopic methods.



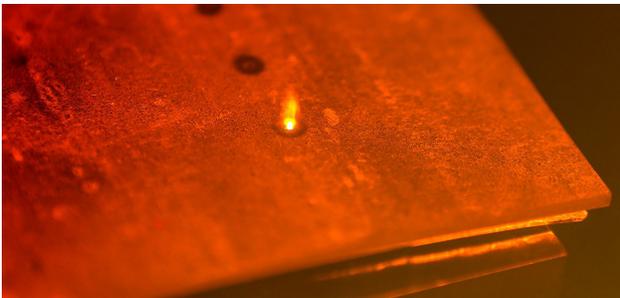
Schematische Darstellung des LIBS-Prinzips am Beispiel der Untersuchung von Kautschukelastomeren. Ein Laser verdampft die Probe und erhitzt die entstehende Wolke bis zu einem Plasma. Beim Abkühlen der Plasmawolke emittieren die atomaren Bestandteile charakteristische Linien, welche mit einem Spektrometer erfasst werden.
 Schematic representation of the LIBS principle using the example of the investigation of rubber elastomers. A laser vaporizes the sample and heats the resulting cloud into a plasma. When the plasma cloud cools down, the atomic components emit characteristic lines, which are recorded with a spectrometer.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Eine für diese Aufgabe gut geeignete Methode ist die laserinduzierte Plasmaspektroskopie (LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy), eine schnelle Technik der chemischen Elementanalyse. Dabei wird ein energiereicher Laserpuls auf die Probenoberfläche fokussiert, um Material zu verdampfen und daraus ein Plasma zu erzeugen. Beim Abkühlen dieses Plasmas entstehen elementspezifische Emissionslinien, welche spektroskopisch analysiert werden. Die Größe der von LIBS beprobten Flächen ist dabei deutlich kleiner als 1 mm und erlaubt so durch Rastermessungen eine Verteilungsbestimmung von chemischen Elementen.

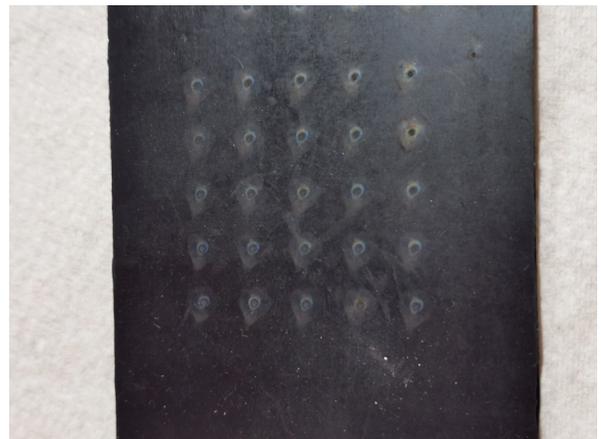
Am IFNANO wird in Kooperation mit dem Deutschen Institut für Kautschuktechnologie genau diese Methode angewandt, um die Verteilungsgüte von Schwefel in Kautschukmischungen zu messen. Ziel ist es, quantitative und reproduzierbare Messungen zu ermöglichen. Dazu sollen die Schwefellinien bei ~180 nm genutzt werden. Zudem folgt die Integration eines zweiten Lasers, mit dem die in der Grundlagenforschung erprobte Doppelpulstechnik angewandt werden kann. Dies erhöht die Emissionsintensität des Plasmas drastisch und liefert damit ein verbessertes Signal-zu-Rauschen-Verhältnis.



▲ Foto vom LIBS-Plasma während einer Rastermessung an einer Aluminium-Platte, aufgenommen durch ein gefärbtes Schutzfilterglas.
Photo of the LIBS plasma during a grid measurement on an aluminum plate taken through colored protective filter glass.

A method well suited for this task is laser-induced plasma spectroscopy (LIBS, Laser Induced Breakdown Spectroscopy), a fast technique of chemical element analysis. A high-energy laser pulse is focused on the sample surface in order to vaporize material and generate a plasma from it. When this plasma cools down, element-specific emission lines arise, which are analyzed spectroscopically. The size of the areas sampled by LIBS is significantly smaller than 1 mm and thus enables the distribution of chemical elements to be determined by means of grid measurements.

At the IFNANO, in cooperation with the German Institute for Rubber Technology, exactly this method is used to measure the distribution quality of sulfur in rubber compounds. The aim is to enable quantitative and reproducible measurements. The sulfur lines at ~ 180 nm should be used for this. In addition, a second laser will be integrated with which the double-pulse technology, which has been tried and tested in basic research, can be used. This increases the emission intensity of the plasma drastically and thus provides an improved signal-to-noise ratio.



▲ Foto eines Kautschukfells nach LIBS-Rastermessungen zur Bestimmung der Verteilungsgüte von Schwefel.
Photo of a rubber head after LIBS grid measurements to determine the distribution quality of sulfur.

Photonische Sensorik

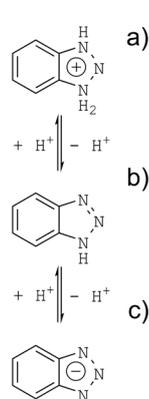
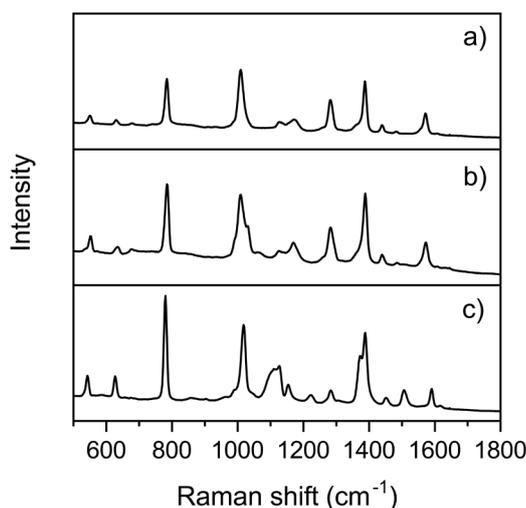
Photonic Sensor Technologies

Benzotriazol-vor-Ort-Analytik zum Nachweis von Benzotriazol im Abwasser

Benzotriazol (BTA) ist eine weitverbreitete Industriechemikalie. Sie wird u.a. als Korrosionsschutzmittel, in Kühlflüssigkeiten oder in Frostschutzmitteln, verwendet. Der Verbrauch allein in Europa liegt bei über 1000 Tonnen pro Jahr. Es ist schwer abbaubar und wird daher in Kläranlagen nur zu einem kleinen Anteil eliminiert. Somit gelangt es in großen Mengen in Flüsse und Seen. Dabei wird BTA als umweltschädlich und gesundheitsschädlich eingestuft. Der Nachweis und die Konzentrationsbestimmung von Benzotriazol erfolgt gewöhnlich durch eine Kombination von chromatographischen Trennverfahren und der Massenspektroskopie (HPLC/MS/MS-Kopplung). Diese Art der Trennung und Identifizierung ist jedoch kosten- und zeitintensiv. Daher wird an einem preiswerten Vor-Ort-Analyseverfahren geforscht, welches auf der oberflächenverstärkten Raman-Streuung (SERS) beruht. In diesem Zusammenhang wurden kostengünstige SERS-Substrate der Firma AtolD evaluiert. Diese verfügen über stochastisch erzeugte Nanostrukturen, die anschließend mit Silber (RandaS) oder Gold (MatoS) beschichtet werden.

On-site analysis for the detection of benzotriazole in wastewater

Benzotriazole (BTA) is a widely used industrial chemical. It is used as a corrosion inhibitor, in coolants, and as antifreeze. Consumption in Europe alone is over 1000 tons per year. However, does not degrade well, and therefore only a small proportion can be eliminated in wastewater treatment plants. It thus ends up in rivers and lakes in large quantities and pollutes the environment. BTA is classified as harmful to the environment and health by the authorities. The detection and concentration determination of benzotriazole is usually achieved by a combination of chromatographic separation techniques and mass spectroscopy (HPLC/MS/MS coupling). However, this type of separation and identification is both cost and time intensive. Thus, a cost-effective on-site analysis method based on surface-enhanced Raman scattering (SERS) is being researched. In this context, low-cost SERS substrates from the company AtolD were evaluated. These have stochastically generated nanostructures that are subsequently coated with silver (RandaS) or gold (MatoS).



◀ BTA-Spektren, gemessen auf dem Substrat RandaS bei einer Anregungswellenlänge von 785 nm. a)-c) SERS-Spektren von BTA gelöst in Wasser unter verschiedenen pH-Wert-Bedingungen: a) basisch, pH 10,98, b) neutral, pH 7,01 und c) sauer, pH 1,04.

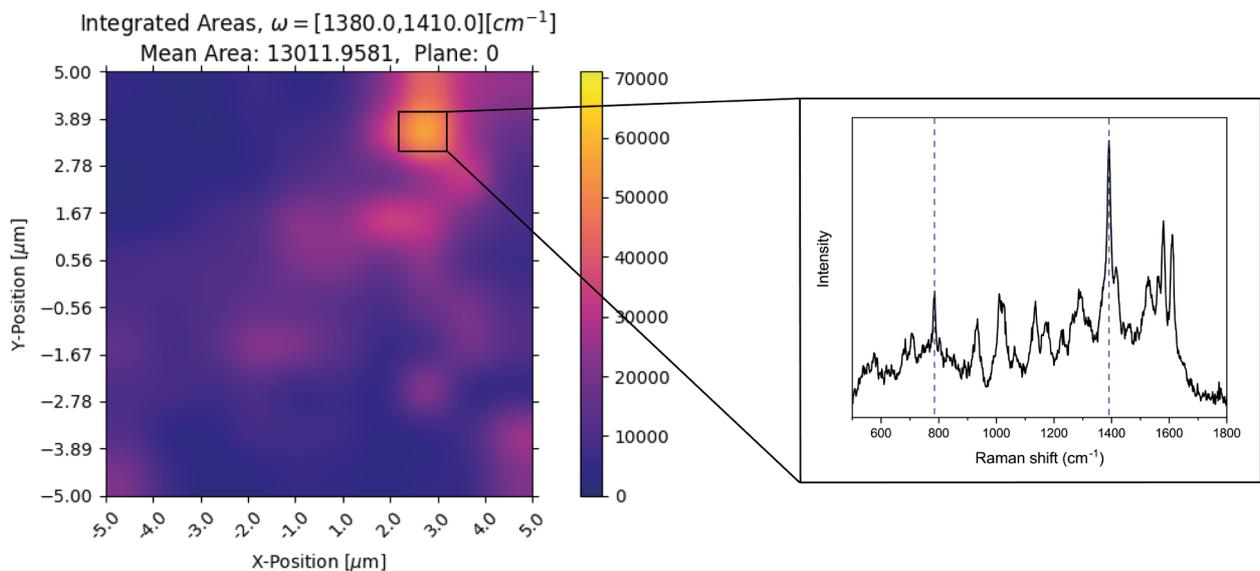
BTA spectra measured on the substrate RandaS with an excitation wavelength of 785 nm. a)-c) SERS spectra of BTA dissolved in water under different pH conditions: a) basic pH 10.98, b) neutral, pH 7.01 and c) acidic pH 1.04.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Je nach pH-Wert der wässrigen Umgebung kann BTA in protonierter bis deprotonierter Form vorliegen. Es konnte gezeigt werden, dass alle drei Variationen mit den ausgewählten Substraten detektiert werden können. Häufig werden SERS-Substrate spektroskopisch nur punktuell ausgelesen. Gerade bei stochastisch erzeugten Nanostrukturen können hierbei Informationen verloren gehen. Aus diesem Grund wurde ein Verfahren entwickelt, mit dem sich größere Bereiche von SERS-Substrat-Oberflächen analysieren und auswerten lassen. So können Areale mit großer Signalverstärkung ermittelt werden, was für die Analyse von Spurenkonzentrationen von essentieller Bedeutung ist.

Depending on the pH of the aqueous environment, BTA can be present in protonated to deprotonated form. It could be shown that all three variations can be detected with the selected substrates. Often, SERS substrates are only read out selectively by spectroscopy. Especially in the case of stochastically generated nanostructures, information can be lost. For this purpose, a method was developed where larger areas of SERS substrate surfaces can be analyzed and evaluated. Hence, areas with large signal amplification can be determined, which is essential for the analysis of trace concentrations.



2D-Intensitäts-Kartierung von 100 gemessenen Einzelspektren in einem $10 \times 10 \mu\text{m}$ großen Abschnitt auf einer RandaS-SERS-Substrat-Oberfläche. Aufgetragen wurde die Signalfäche der Triazol-Streckschwingung von BTA bei 1390 cm^{-1} in den Integrationsgrenzen von 1380 cm^{-1} bis 1410 cm^{-1} .

2D intensity mapping of 100 measured individual spectra in a $10 \times 10 \mu\text{m}$ section on a RandaS SERS substrate surface. The signal area of the triazole stretching of BTA at 1390 cm^{-1} in the integration limits from 1380 cm^{-1} to 1410 cm^{-1} was plotted.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Resonatorverstärkte Raman-Spektroskopie für die Prozessanalytik und Temperaturmessung von plasmonischen Metall-Nanopartikeln

Aufgrund des Klimawandels und der Umweltverschmutzung kommt der Gasanalytik im zivilen und industriellen Bereich eine enorme Bedeutung zu. Da die Industrie versucht, auf null Emissionen umzustellen, müssen Arbeitsprozesse optimiert und überwacht werden. Dabei sollen einerseits hohe Qualitätsstandards gewährleistet werden, andererseits aber auch ein hohes Maß an Sicherheit. Hier stellt die (Ab-)Gaszusammensetzung einen Indikator für diese Standards. Daher ist für komplexe Gasverbindungen eine hochselektive und schnelle Online-Detektion erforderlich.

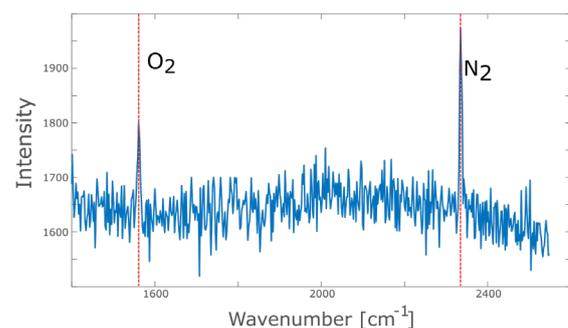
In dieser Arbeit entwickeln wir ein neues Detektionssystem, das schnelle und nichtinvasive optische Methoden mit hochselektiver Gaschromatographie kombiniert.

In unserer Forschung wird die Raman-Spektroskopie genutzt, um mit ihr verschiedene Gase in einer komplexen Matrix zu bestimmen. Die Raman-Spektroskopie hat jedoch ein intrinsisches Handicap aufgrund ihres geringen Streuquerschnitts im Vergleich zu anderen Methoden. Dies kann durch den Einsatz von Multi-Pass-Zellen überwunden werden. Dies wird wiederum als Cavity-Enhanced-Raman-Spektroskopie bezeichnet. Sie führt zu einer Erhöhung der Interaktionslänge mit der Probe und zur Bildung von Brennpunkten innerhalb der Multi-Pass-Zelle, wodurch die lokale Leistungsdichte erhöht wird. Diese Multi-Pass-Zelle kann dann mit einem Gaschromatographen kombiniert werden, was zu einer noch höheren Selektivität führt.

Erste Raman-Spektren der Multi-Pass-Zelle mit Signalen von O₂ und N₂.
 First Raman spectra of air with the multipass cell showing signals of O₂ and N₂.

Cavity-enhanced Raman spectroscopy for process analytics and thermometry of plasmonic metal nanoparticles

Due to climate change and environmental pollution, gas analysis in the civilian and industrial sector is of tremendous importance. As industry tries to convert to zero emissions, work processes have to be optimized and monitored. On the one hand, high quality standards are to be guaranteed, while on the other hand, a high level of security is also to be maintained. The (exhaust) gas composition is thereby an indicator for these standards. Therefore, highly selective and rapid online detection is needed for complex gas compounds. In this work, we developed a new detection system, combining fast and noninvasive optical methods with highly selective gas chromatography. In our research, Raman spectroscopy is exploited, since Raman spectra can be used to determine different gases in a complex compound matrix. Nonetheless, Raman spectroscopy has an intrinsic disadvantage due to a low scattering cross section when comparing it to other methods. This can be overcome by using multipass cells, which in turn then is called cavity-enhanced Raman spectroscopy (CERS). This leads to an increase in interaction length with the sample and the creating of foci inside the multipass cell, thus enhancing the local power density. This multi-pass cell can then be combined with a gas chromatograph, resulting in an even higher selectivity.

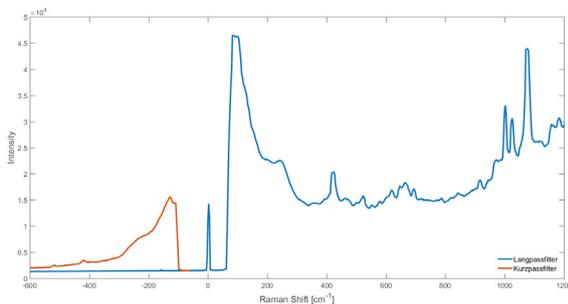


Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

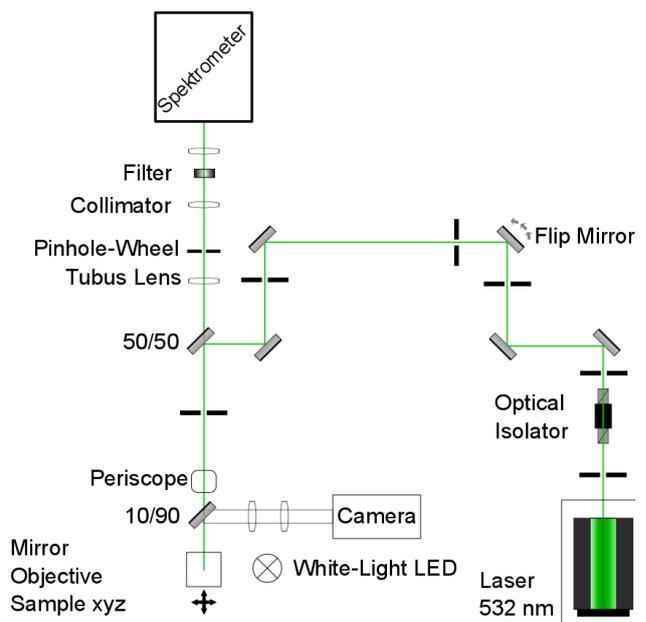
Raman-Streuung ist universell und nicht nur in Gasen sichtbar, sondern auch z.B. bei Feststoffen. Dies kann dann im aufstrebenden Bereich der plasmonenunterstützten Photokatalyse verwendet werden, einem Prozess, der einen großen Schritt in Richtung einer effizienteren Erzeugung von grünem H_2 darstellt und so zu umweltfreundlicheren Industrien führt.

Dabei ist die Kenntnis der Temperatur unabdingbar. Ein Blick auf die blauverschobene Raman-Streuung (Anti-Stokes-Linien) gibt zusätzliche Informationen über den Analyten. Dabei gibt das Verhältnis zwischen Stokes- und Anti-Stokes-Linien Aufschluss über die Temperatur des Analyten. Dies wird in einem konfokalen Raman-Mikroskopie-Aufbau verwendet, um die Temperatur von Metall-Nanopartikeln zu messen. Darüber hinaus wird die Lumineszenz dieser Partikel als zusätzliche Methode verwendet, um ihre Temperatur zu berechnen und beide Temperaturmessmethoden zu korrelieren. Diese Temperaturmessungen werden verwendet, um zusammen mit unserem Partner von der Ben-Gurion-Universität in Israel eine theoretische Beschreibung der Temperaturfunktion von Metall-Nanopartikeln und einen Leitfaden zur Verwendung dieser Partikel für die plasmonengestützte Photokatalyse zu ermöglichen.



Schematischer Aufbau für das konfokale Mikroskop zur Messung des Raman und der Fluoreszenz von Nanopartikeln. Schematic setup for the confocal microscopy setup for the measurement of the Raman and fluorescence of nanoparticles.

Raman scattering is universal and not only visible in gases but also, e.g. in solids. This can be then used in the emerging field of plasmon-assisted photocatalysis, a process which is a huge step towards more efficient generation of green H_2 , thus leading to more environmentally friendly industries. In this process, knowledge of the temperature is essential. Looking at the blue-shifted Raman scattering (Anti-Stokes lines) gives additional information about the analyte. Here, the ratio between the Stokes and Anti-Stokes lines gives information about the temperature of the analyte. This is used in a confocal Raman microscopy setup to measure the temperature of metal nanoparticles. Additionally, the luminescence of these particles is used as an additional method to calculate their temperature and correlate both temperature measurement methods. Together with our partner from Ben-Gurion University in Israel, these temperature measurements are used to allow a theoretical description of the temperature function of metal nanoparticles and a guideline for the usage of these particles for plasmon-assisted photocatalysis.



Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

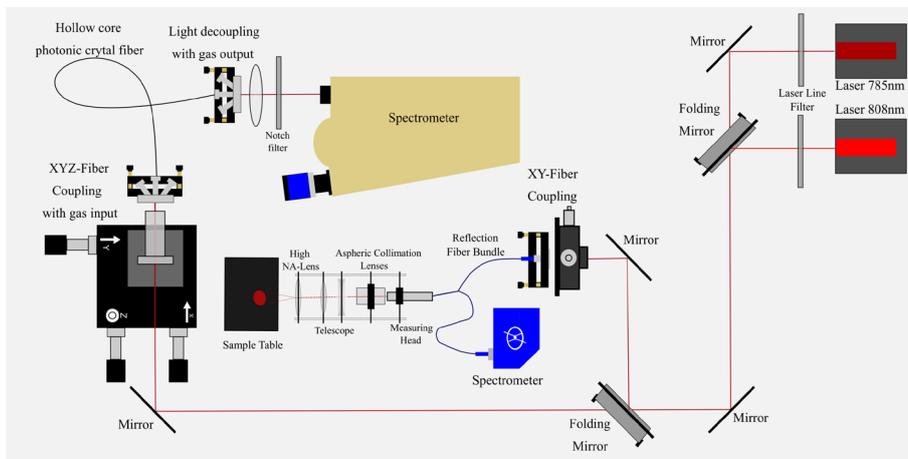
Faserintegriertes Raman-Spektrometer zur Gasanalyse

Die Nachfrage nach preisgünstiger Sensorik steigt stetig und wird zurzeit durch die Digitalisierung und damit einhergehend Industrie 4.0 und auch Medizin 4.0 noch weiter angetrieben. Um die vielfältigen Bedürfnisse aus verschiedenen Industrien zu befriedigen, braucht es eine Technik, die gleichzeitig sowohl Prozesse überwachen als auch Produkte analysieren kann. Für die chemische Analyse bietet sich die Raman-Spektroskopie an. Bereits vorhandene Raman-Geräte für die Prozesstechnik haben sich hier vor allem im oberen Preissegment angesiedelt. Für die Inline Messung in einigen Branchen sind Raman-Geräte jedoch noch unrentabel und nicht genügend sensitiv. Damit Raman-Sensoren konkurrenzfähig zu den momentan etablierten Halbleitersensoren werden, wie sie z.B. zur Gasanalyse eingesetzt werden, bedarf es der Verstärkung des Raman-Effekts selbst und einer Weiterentwicklung der bisher vorhandenen Raman-Spektrometer durch technische Verbesserungen und kostengünstigere Herstellung. das gerade begonnene Vorhaben mit dem Projekt partner FiSens GmbH an.

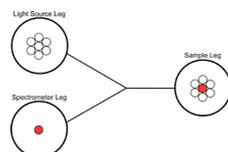
Fibre Bragg Raman spectrometer for gas analysis

The demand for inexpensive sensor technology has steadily increased and is currently being further increased by digitalization and the associated Industry 4.0 and Medicine 4.0. In order to satisfy the diverse needs from different industries, a technology is needed that can monitor the processes as well as analyze the products at the same time. Raman spectroscopy is ideal for this task. Existing Raman devices for process technology have mainly settled in the upper price segment. For inline measurements in some industries, however, the existing devices are either too expensive or not sufficiently sensitive.

To make Raman sensors competitive with these currently established semiconductor sensors, such as those used for gas analysis, two targets have to be met: the amplification of the Raman effect itself and the further development of the existing Raman spectrometers through technical improvements and a more cost-effective production. This is where the project together with the project partner FiSens GmbH starts.



Schematische Darstellung des Probenkopfes für die Raman-Spektroskopie. Schematic of the probe.



Schematische Darstellung der Aufbauten für die faserverstärkte Raman-Spektroskopie. Schematic of the setups for the fiber-enhanced Raman spectroscopy.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Aktuelle Spektrometer profitieren vor allem preis-technisch von der Massenproduktion von Detektoren und Lasern. In diesem Projekt wird ein neuer Ansatz zur weiteren Preisminderung eines Raman-Spektrometers gewählt. Hier sollen spezielle Faser-Bragg-Gitter die Funktion des dispersiven Elementes übernehmen und auch den Kerbfilter ersetzen.

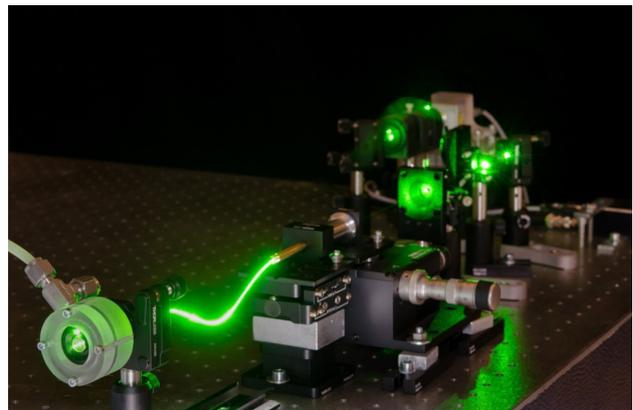
In dem Projekt wird des Weiteren eine Messsonde entwickelt, die an die neuen Spektrometer gekoppelt werden kann zur Messung von festen und flüssigen Proben. Zur Verbesserung der Raman-Signale, um auch Gase in kurzer Zeit messen zu können, wird der Einsatz photonischer Kristallfasern für die faserverstärkte Raman-Spektroskopie erforscht. Die photonischen Kristallfasern können in ihrem Hohlkern nicht nur das Licht durch Ausnutzung der photonischen Bandlücke besonders räumlich fokussiert leiten, sondern auch das zu messende Gasgemisch. Somit erhält man eine Verstärkung des Raman-Signals aufgrund der langen Wechselwirkungsstrecke und der hohen Lichtintensität im Kern. Um ein Gasgemisch in die Faser einzuleiten, wird eine Gaseinzelle entwickelt.

Current spectrometers benefit primarily in terms of price from the mass production of detectors and lasers. In this project, a novel approach was chosen to further reduce the price of a Raman spectrometer. Here, special fiber Bragg gratings will take over the function of the dispersive element and also replace the notch filter.

In the project, a measuring probe is additionally being developed that can be coupled to the new spectrometer for measuring solid and liquid samples. To improve the Raman signals so that gases can also be measured in a short time, research in photonic crystal fibers for fiber-enhanced Raman spectroscopy being is performed. The photonic crystal fibers can not only guide the light in a particularly spatially focused manner inside their hollow core by utilizing the photonic band gap but also the gas mixture to be measured. This results in an amplification of the Raman signal due to the long interaction path and the high light intensity inside the core. To introduce a gas mixture into the fiber, a gas inlet cell is also being developed.



▲ Bild des Faser-Bragg-Grating-Spektrometers.
Picture of the miniature Fiber-Bragg-Grating-Spektrometer.



▲ Aufbau zur Messung von Gasen in photonischen Kristallfasern.
Setup for the gas analysis using hollow-core photonic crystal fibre.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Sensorik zur Verbesserung der Patientensicherheit

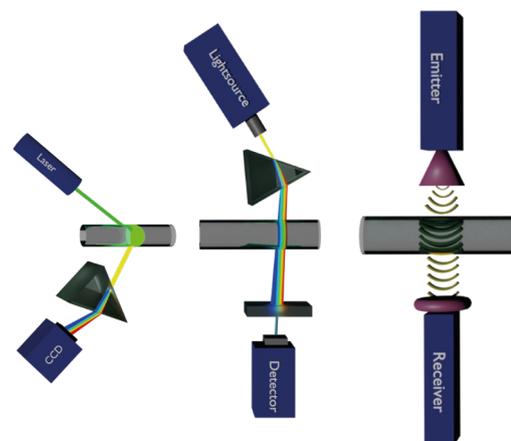
Ein Fehler bei der Zubereitung oder der Verabreichung von Infusionslösungen kann schwerwiegende Folgen haben. Hierdurch hervorgerufene Komplikationen können im schlimmsten Fall zum Tod des Patienten führen. Die Bedeutung und das Ausmaß des Schadens werden deutlich, wenn man berücksichtigt, dass in Europa jedes Jahr mehr als 600 Millionen Infusionen intravenös an Patienten verabreicht werden. Abschätzungen zufolge sind davon 5 % fehlerbehaftet, was in Summe 30 Millionen Fehlmedikationen entspricht. Es gibt bisher für die Überwachung von Infusionen keine technische Lösung. Wir erforschen Sensoren, die die Sicherheit der Patienten maßgeblich verbessern können. Dazu soll ein Sensorsystem entwickelt werden, welches die Medikationen anhand ihrer chemisch-physikalischen Eigenschaften schnell identifizieren kann. Bei den Medikationen handelt es sich beispielsweise um Antibiotika, Schmerzmittel, Insulin und Chemotherapeutika, die in Trägerlösungen verabreicht werden. Um diese Ansprüche zu erfüllen, werden Sensoren auf der Basis von Brechungsindex, Ultraschall, Absorption und Raman-Streuung untersucht. Basierend auf den Untersuchungen wird eine Kombination an Sensoren für die Überprüfung der Infusionen ausgewählt.



▲ Foto einer Patientin, angeschlossen an diversen Überwachungs- und Medikations-Systemen.
Photograph of a patient connected to several monitoring and medication systems.

Sensor technology to improve patient safety

An error in the preparation or administration of infusion solutions can have serious consequences. In the worst case, complications caused by this can lead to the death of the patient. The importance and extent of the damage becomes clear when one considers that in Europe more than 600 million infusions are administered intravenously to patients every year. According to estimates, 5 % of these are error-prone, which corresponds to a total of 30 million incorrect medications. There is no technical solution for infusion monitoring so far. We are exploring sensors that can significantly improve patient safety. For this purpose, a sensor system should be developed that can quickly identify the medications based on their chemical-physical properties. The medications are, for example, antibiotics, painkillers, insulin, and chemotherapy drugs that are administered in carrier solutions. To meet these demands, sensors based on refractive index, ultrasound, absorption, and Raman spectroscopy are being examined. Based on the investigations, a combination of sensors is selected for monitoring the infusions.



▲ Schematische Darstellung der verwendeten Messmethoden (Raman, UV-VIS- und Ultraschall-Spektroskopie).
Schematic representation of the employed measurement methods (Raman, UV-VIS, and ultrasound spectroscopy).

Photonische Sensorik

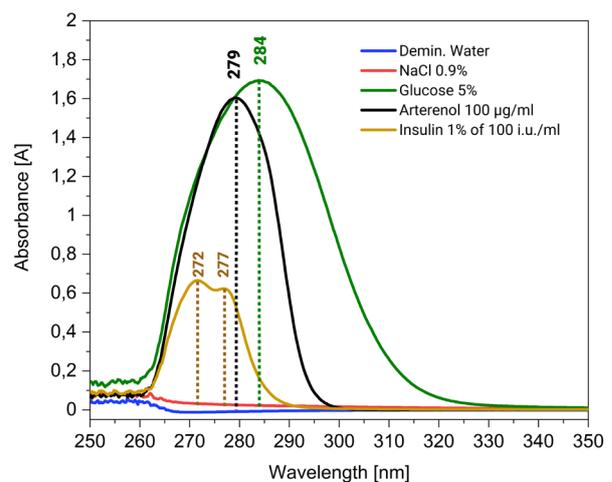
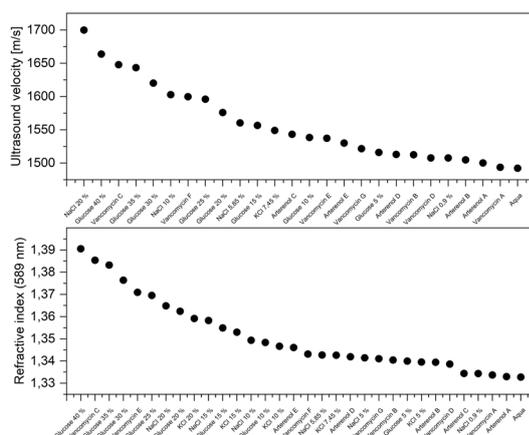
Photonic Sensor Technologies

Das Sensorsystem kann als Point-of-Care-Gerät patientennah in Kombination mit Spritzenpumpen eingesetzt werden oder als Stand-alone-Gerät in der Apotheke.

Nun eignen sich weder Brechungsindex noch Ultraschallgeschwindigkeit für eine eindeutige Identifikation von Lösungen. Da aber bei der Verabreichung von Infusionen nur bestimmte Konzentrationen angewandt werden, finden wir bei unseren Untersuchungen bis auf einzelne Ausnahmen eindeutige Zuordnungen. Damit können diese Techniken einen wichtigen Beitrag zur Überprüfung leisten. Vielversprechend erscheint eine Kombination aus zwei Sensoren, einerseits UV-VIS Absorption oder Raman-Streuung mit Refraktometrie oder Ultraschallgeschwindigkeitsmessung. Dafür werden in diesem Vorhaben die unterschiedlichen Sensoren für den Anwendungsfall in der Intensivmedizin und in der Apotheke evaluiert. Basierend auf diesen Erkenntnissen werden geeignete Sensorkombinationen für die unterschiedlichen Anwendungsfälle realisiert und eine automatisierte Datenverarbeitung und Datenbank erstellt, um durch einen Abgleich die Infusionen zu erkennen.

The sensor system can be used as a point-of-care device close to the patient in combination with syringe pumps or as a stand-alone device in pharmacies. However, neither refractive index nor ultrasonic speed is suitable for a clear identification of solutions. Since only certain concentrations are used in the administration of infusions, we find clear assignments in our investigations, with single exceptions. Thus, these techniques can make an important contribution to verification. A combination of two sensors seems promising, on the one hand UV-VIS absorption or Raman scattering and, on the other hand, refractometry or analysis of ultrasonic speed.

For this purpose, the different sensors for use in intensive care medicine and in pharmacies were evaluated in this project. Based on these findings, suitable sensor combinations for the different applications were realized, and automated data processing and a database are being created in order to detect the infusions by means of a comparison.



▲
Ultraschallgeschwindigkeit, Brechungsindex und UV-VIS-Absorption von Infusionslösungen, verabreicht durch Spritzenpumpen.
Ultrasonic speed, refractive index, and UV Absorption of infusions administered by syringe pumps.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Schnelle optische Messung der Glasspannung in drei Dimensionen

Glas ist zunehmend zu einem industriellen High-techprodukt geworden. In der Automobilindustrie werden z.B. Frontscheiben mit immer komplexeren Funktionen belegt: Sie sind beheizbar, lassen sich verdunkeln und es werden Assistenzsysteme wie Kameras und Sensoren angebracht. Diese zusätzliche Funktionalität geht jedoch mit einer Änderung des Spannungshaushaltes des Glases einher. Für die Industrie wird es somit immer wichtiger, die Spannungen in den zu verbauenden Gläsern präzise bestimmen zu können, um Glasbruch zu vermeiden und damit ressourcenschonender zu arbeiten. Nichtdestruktive Messverfahren haben hierbei den entscheidenden Vorteil, dass sie direkt in der Produktion eingesetzt werden können und auf Grundlage der Messergebnisse direkt Einfluss auf den Herstellungsprozess genommen werden kann, so dass sich der Ausschuss verringert. Um die bisher unerreichte Präzision von Messgeräten für Spannungen im Glas zu realisieren, hat sich ein Verbund mit Schmidt & Haensch, Saint-Gobain Sekurit und VW gebildet, in dem ein nichtinvasiven optischer Ansatz zur Messung der Eigenspannung von Fahrzeugverglasungen erforscht und entwickelt wird.

Fast optical measurement of glass tension in three dimensions

Glass has increasingly become a high-tech industrial product. In the automotive industry, for example, front windows are being assigned increasingly complex functions: they can be heated, and be darkened, and assistance systems such as cameras and sensors are installed. However, this additional functionality is accompanied by a change in the tension balance of the glass. It is therefore becoming more and more important for the industry to be able to precisely determine the stresses in the glass to be installed in order to avoid glass breakage and thus to work in a more resource-conserving manner. Nondestructive measurement methods have the decisive advantage that they can be used directly in the production and that the measurement results can be used to influence the manufacturing process directly, such that rejects are reduced. In order to achieve the previously unattainable precision of measuring devices for stresses in glass, a network with Schmidt & Haensch, Saint-Gobain Sekurit, and VW has been formed in which a noninvasive optical approach for measuring the internal stress of vehicle glazing is being researched and developed.

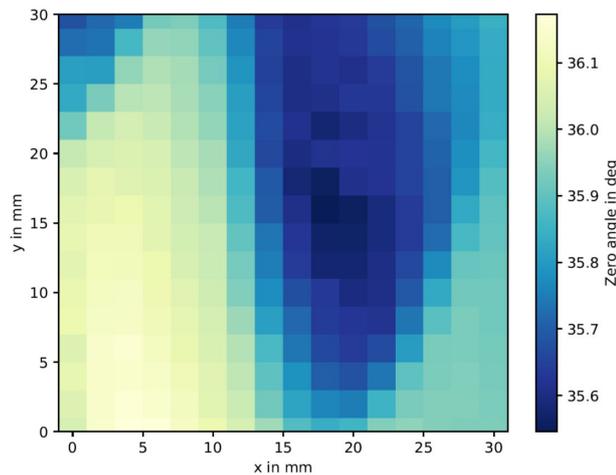


◀ Zerborstene Frontscheibe im Auto.
Broken windshield in a car.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Zur Messung soll hierbei die Polarisation des Lichtes benutzt werden. Der Polarisationszustand des von der Glasscheibe reflektierten oder rückgestreuten Lichtes wird dabei von der vorherrschenden Spannung im Glas beeinflusst. Die höchstpräzise Messung der Polarisation ermöglicht so kontaktlos die Spannung des Glases zu bestimmen. Bereits auf dem Markt erhältliche Messgeräte (meist Handgeräte) beruhen auch auf dem Prinzip der Polarimetrie. Sie weisen jedoch nicht die für Windschutzscheiben notwendige Auflösung und Genauigkeit auf und sind insbesondere nicht in der Lage, Eigenspannungen dreidimensional geformter Scheiben vollflächig und tiefenaufgelöst zu erfassen. Das in diesem Verbundvorhaben zu entwickelnde Messsystem soll so diese Lücke schließen und die gesamte Frontscheibe schnell und ortsaufgelöst mit sehr hoher Genauigkeit vermessen.



▲ Ortsaufgelöste Messung einer Frontscheibe. Die Differenz der Polarisationsmessung entspricht einer Spannung von etwa 5 MPa.
Spatially resolved measurement of a windshield. The difference in the polarization measurement corresponds to a stress of about 5 MPa.

The polarization of light should be used for the measurement. The polarization state of the light reflected or backscattered by the glass pane is influenced by the prevailing tension in the glass. The extremely precise measurement of the polarization enables the tension of the glass to be determined without contact. Measuring devices already available on the market (mostly hand-held devices) are also based on the principle of polarimetry. However, they do not have the resolution and accuracy required for vehicle windows and, in particular, are not able to detect residual stress in three-dimensionally shaped windows over the entire surface and with depth resolution. The measuring system to be developed in this joint project is intended to close this gap and measure the entire windshield quickly and in a spatially resolved manner with very high accuracy.



▲ Polarimetrische Weißlichtaufnahme von Plastik. Regionen unterschiedlicher Färbung geben Unterschiede in der Spannung wieder.
White-light polarimetry of plastic. Differences in stress are shown with different colors.

Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Brandfrühwarnsystem für Lithium-Ionen-Akkumulatoren

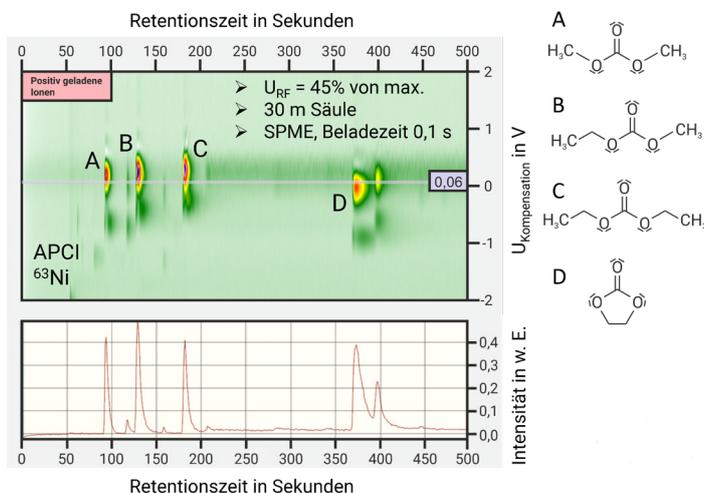
Bestandteil des Maßnahmenpakets der Bundesregierung für die Energiewende ist der Ausbau der Elektromobilität mit dem Ziel, dass bis 2030 sieben bis zehn Millionen Elektrofahrzeuge in Deutschland zugelassen sein sollen. Hierfür werden Lithium-Ionen-Akkus benötigt. Wie alle neuen Techniken bringt auch diese Gefahren mit sich. So kann es bei verschiedenen Lithium-Ionen-Akkus mit flüssigen oder polymeren Elektrolyten zum thermischen Durchgehen kommen, die oft mit Selbstentzündung oder Explosion endet. Auslöser sind oft Unfälle, wobei der Zeitpunkt zwischen Havarie und Unfall mehrere Tage betragen kann. Aber auch beim Laden sind solche Vorfälle bekannt. Die Früherkennung der Akkuhavarie mit dem Ziel der Schadensbegrenzung ist Gegenstand des hier vorgestellten Projektes mit dem Partner Stöbich GmbH.

Von den in den Lithium-Ionen-Akkus hierbei ablaufenden komplexen Prozessen ist bekannt, dass flüchtige organische Verbindungen freigesetzt werden. Unsere Untersuchungen haben ergeben, dass die Freisetzung in zwei Stufen erfolgt:

Early fire-warning system for lithium-ion batteries

One aspect of the German Federal Government's package of measures for the energy transition is the expansion of electromobility - with the goal of seven to ten million licensed electric vehicles by 2030. For this, lithium-ion batteries are required. As with all new techniques, this also entails dangers. Different lithium-ion batteries with liquid or polymer electrolytes can cause thermal runaway, which often ends in self-ignition or explosion. Such events are often triggered by traffic accidents, although the time between the accident and the runaway of the battery can last up to several days. Such incidents are also known during charging. The early detection of a runaway battery with the aim of limiting damage is the subject of the project with our partner Stöbich GmbH presented here.

It is known that the complex processes taking place in lithium-ion batteries lead to the release of volatile organic compounds. Our research has shown that the release occurs in two stages:



Gas chromatogram, erstellt mit einem Gaschromatographen mit IMS-Detektor. Gelungener Nachweis der in Li-Ionen-Batterien vorkommenden Carbonsäureester Dimethylcarbonat (A), Ethylmethylcarbonat (B), Diethylcarbonat (C) und Ethylencarbonat (D). Gas chromatogram created with a process gas chromatograph with IMS detector: successful detection of the carboxylic acid esters dimethyl carbonate (A), ethyl methyl carbonate (B), diethyl carbonate (C) and ethylene carbonate (D) found in Li-ion batteries.

Photonische Sensorik

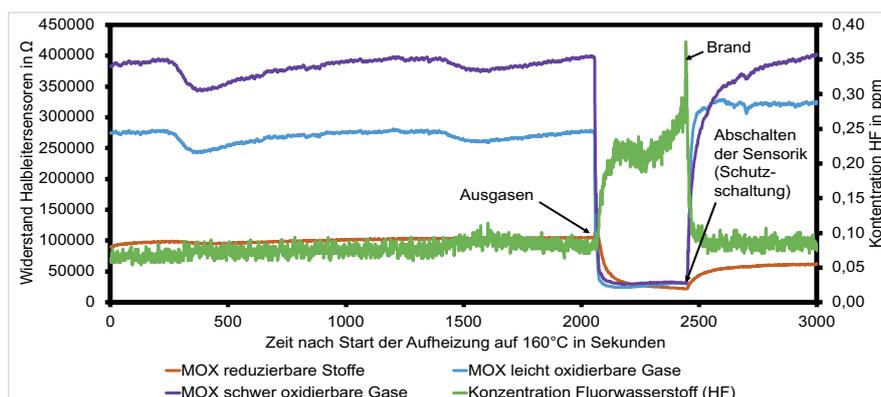
Photonic Sensor Technologies

1. Die erste Ausgasung bestehend aus verdampfenden Elektrolyt. Hierbei handelt es sich um Carbonsäureester.
2. Die Ausgasung durch den eigentlichen Batteriebrand. Hier entstehen unkontrolliert viele Verbrennungsprodukte. Hervorzuheben ist hier Fluorwasserstoff.

Carbonsäureester können sehr gut mit Hilfe der Ionenmobilitätsspektrometrie detektiert werden. Hierbei konnte die Erkenntnis gewonnen werden, dass die Ionenmobilitätsspektrometrie mit einer auf einen Beta-Strahler basierenden Ionenquelle ein erfolgversprechender Ansatz ist. Diese Technologie basiert aber auf sehr teuren und aufwendig konstruierten Apparaturen und ist somit nur für zahlungskräftige Anwender eine Option. Daher erfolgte die Entwicklung einer Havarie-Monitoring-Sensorik auf Basis von erschwinglichen Halbleitersensoren (MOX-Sensoren). Hierbei wurde ein Dreifachsensor, dessen einzelne Sensormodule jeweils optimal auf leicht oxidierbare, schwer oxidierbare und gut reduzierbare Substanzen ansprechen, getestet. Zudem wurde ein temperaturmodulierter Halbleitersensor evaluiert, der 48 Messkanäle mit substanzspezifischen Informationen bereitstellen kann. Die Sensorik wurde mit elektrochemischen Sensoren unter anderem für Fluorwasserstoff ergänzt. Mit diesem System ist das Monitoring von durch Überhitzung von Lithium-Ionen-Batterien ausgelösten Havarien gelungen.

1. The first outgassing consists of evaporating electrolyte. These are carboxylic acid esters.
2. The outgassing caused by the actual battery fire. Many combustion products are produced here in an uncontrolled manner. Here, hydrogen fluoride should be emphasized.

Carboxylic acid esters can be detected very well by means of ion mobility spectrometry. It was possible to gain knowledge that ion mobility spectrometry with an ion source based on a beta emitter is a promising approach for detection. However, this technology is based on very expensive and elaborately constructed equipment and is therefore only an option for solvent users. Therefore, a disaster-monitoring sensor system based on affordable semiconductor sensors (MOX-sensors) was developed. For this purpose, a triple sensor providing individual sensor modules, each with an optimal response to easily oxidizable, difficult to oxidize, and easily reducible substances, was tested. In addition, a temperature-modulated semiconductor sensor providing 48 measurement channels with substance-specific information was evaluated. The sensor system was complemented with electrochemical sensors for hydrogen fluoride, among other substances. Using this system, the monitoring of thermal runaways caused by overheating of lithium-ion batteries has been successful.



Monitoring einer thermisch induzierten Batteriehavarie. Monitoring of a thermally induced battery failure.

Photonische Sensorik

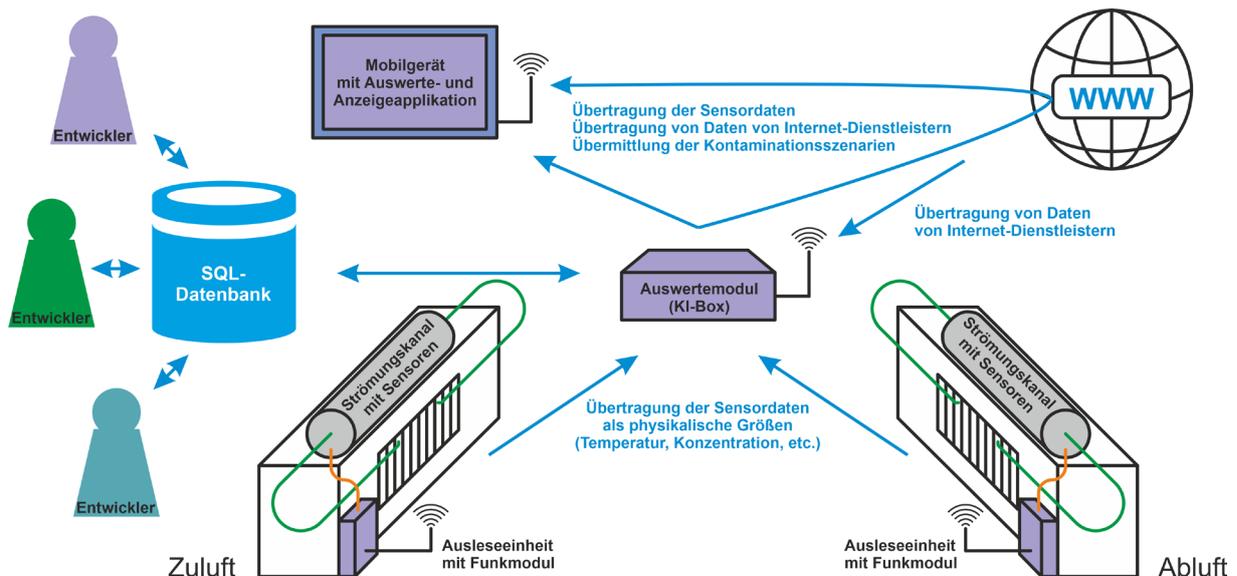
Photonic Sensor Technologies

Sensorgestützter Assistent zur Verbesserung der Luftqualität in Wohnräumen: von der Laboranalytik zur Vor-Ort-Sensorik

Das Geschäftsfeld Smart Home ist ein Wachstumsmarkt, dessen Möglichkeiten bei Weitem noch nicht ausgeschöpft sind. Unter Smart Home versteht man technische Verfahren und Systeme, deren Ziel eine Erhöhung der Sicherheit und Energienutzung sowie der Wohn- und Lebensqualität auf der Basis vernetzter und fernsteuerbarer Geräte und Installationen ist. Da sich eine schlechte Qualität der Raumluft direkt auf die Gesundheit der Bewohner auswirken kann, trägt sie entscheidend zur Wohnqualität bei. Das Projekt beschäftigt sich mit der Fragestellung, inwieweit sich die für die Prüfung der Raumluftqualität notwendige aufwendige Labor-Analytik in eine Sensorik überführen lässt, die robust, einfach und bezahlbar ist. Hierfür wird eine auf künstlicher Intelligenz (KI) basierende Steuerung für Systeme zur Hausbelüftung zusammen mit unserem Partner Idencom Germany GmbH erstellt.

Sensor-assisted improvement of air quality in living spaces: from laboratory analysis to on-site sensors

The Smart Home business area is a growing market. The possibilities in this market are far from being exhausted. A Smart home is understood to mean technical processes and systems that aim to enhance security and energy use as well as the quality of life based on networked and remotely controllable devices and installations. Since poor indoor air quality can have a direct impact on the health of the tenants, it contributes significantly to the quality of living. The project deals with the question of how far the complex laboratory analysis required for testing the indoor air quality can be converted into a sensor system that is robust, simple and affordable. An artificial-intelligence (AI) based control system for home ventilation systems is therefore being developed together with our partner Idencom Germany GmbH.



Schematischer Aufbau des Raumluftassistenzsystems.
Schematic setup of the room air assistance system.

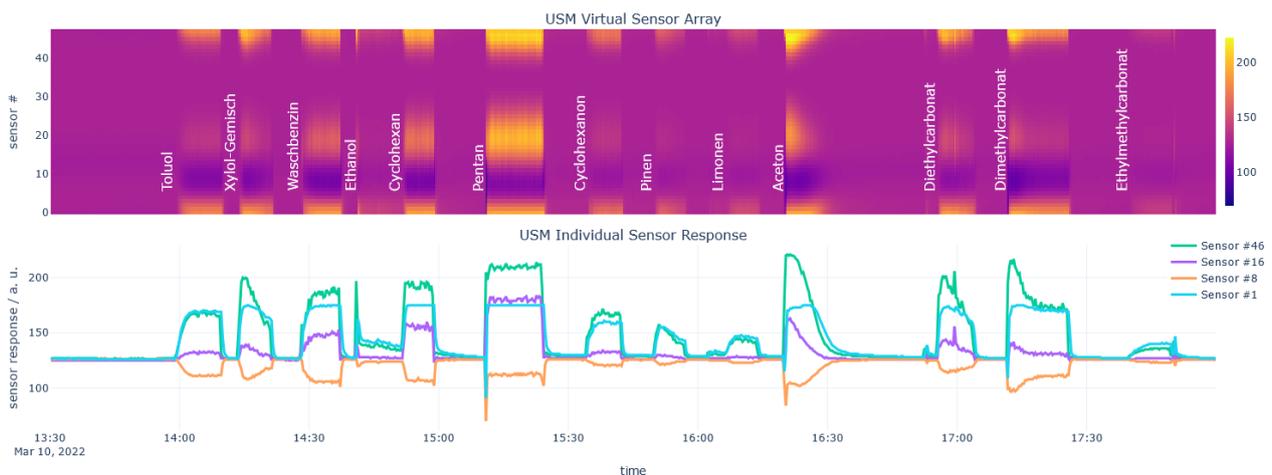
Photonische Sensorik

Photonic Sensor Technologies

Diese basiert auf einer neu erstellten Sensor-Plattform, die neben den üblichen Sensoren für CO₂, Luftfeuchtigkeit und Temperatur auch solche für verschiedene Arten flüchtiger organischer Verbindungen (kurz VOC genannt, für volatile organic compounds), Stickoxide, CO₂ und Feinstaub bereitstellt. Hierdurch und durch zusätzliche Daten von Wetterdiensten oder anderen Diensten, die lokale Feinstaubbelastung, Pollenflug- oder Ozon-Konzentrationen bereitstellen, wird die Datenbasis für eine effektive Beurteilung der Raumluftqualität geschaffen. Die hohe Datenbasis erfordert eine fortschrittliche Auswertung bis hin zu Methoden des überwachten Lernens und bietet die Chance, die Qualität der Raumluft zielgerichtet zu verbessern. Zum Beispiel wird das Aufreißen einer Verpackung – Feinstaub steigt - oder das Öffnen der Fenster – CO₂-Konzentration nimmt ab – anhand der Daten abgebildet werden. Dadurch können geeignete Gegenmaßnahmen effizient veranlasst werden. Das neue Verfahren wird somit eine neue Evolutionsstufe bei der Bewertung und Verbesserung der Raumluftqualität in Wohnräumen begründen.

Not only representative parameters of indoor air quality such as carbon dioxide concentration, temperature, and or air humidity are recorded, but these data are combined and expanded to include other important parameters such as the amount of particulate matter and volatile organic compounds (VOC). This and additional data from weather services or other services that provide local fine dust pollution, pollen count or ozone concentrations create the database for an effective assessment of indoor air quality. The large database requires advanced evaluation including methods of supervised learning, and offers the opportunity to improve the quality of the indoor air in a targeted manner. For example, the opening of a package – rise in ambient particulate matter – or the opening of a window – decrease of CO₂ – is reported by the change in the sensor data. This allows counteractions to be tackled much more effectively.

The new method will thus create a new evolutionary stage in the assessment and improvement of indoor air quality in living spaces.



▲
Sensor-Plattform und Sensor-Daten.
Sensor platform and sensor data.

Projekte Projects

Projekt ARIES:

Adaptive Optiken für die Fluoreszenz-Korrelations-Spektroskopie, gefördert von der EU (EFRE/Niedersachsen)

Projekt CERS-Pro:

Resonatorverstärkte Raman-Spektroskopie für die Prozessanalytik, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt COST:

Towards understanding and modelling intense electronic excitation, gefördert von der EU (COST Action CA17126)

Projekt DIGIT RUBBER:

Erforschung von Techniken zur Überwachung des Extrusionsprozesses mittels spektroskopischer Methoden, gefördert vom BMBF (MaterialDigital)

Projekt OASe:

Optoakustisches Sensorsystem für die Überwachung von Infusionen, gefördert vom BMBF (GO-Bio initial)

Projekt DruckSens:

Eingebettete Wellenleiter in Silikon zur Herstellung eines faseroptischen Drucksensors, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt ELaRA:

Entwicklung eines kompakten Laborsystems für die Röntgen-Absorptionsspektroskopie, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt EPIC-Lens:

Uniformitätskontrolle optischer Präzisionsbeschichtungen auf 2D- und 3D-Komponenten, gefördert vom BMBF (Photonik nach Maß)

Projekt FIHSIW:

Fertigungsintegrierte High-Speed RGB-Interferometrie und Wellenfrontsensorik, gefördert vom BMBF (Photonik Plus)

Projekt GlassPrint:

Digitaler 3D Laserdruck von festem Glas, gefördert von der DFG

Projekt KauLIBS:

Erweiterte Messtechnik zur sicheren und reproduzierbaren Detektion der Verteilungsgüte von Vernetzungsschemikalien in Kautschukmischungen, gefördert vom BMWi (IGF)

Projekt LaDiVo:

Laserunterstützter Digitaldruck keramischer Farben auf vorgespanntem Glas, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt Mark4Live:

Neue Generation von Markierungstechnologie für die Lebendzell-Nanoskopie, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt MUSIK:

Laserdirektgeschriebene multidirektionale, maschinenlesbare holographische Sicherheitskennzeichnungen, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekte Projects

Projekt NanoVidere:

Schnelle monochromatische Reflexionsnanoskopie mittels Absorptionsmodulation, gefördert von der DFG

Projekt NanoVIB:

Nanoscale Visualization to understand bacterial virulence and invasiveness - based on fluorescence nanoscopy and vibrational microscopy, gefördert von der EU (H2020-ICT-36-2020 Disruptive photonics technologies)

Projekt Nano Therm:

High resolution correlative thermometry, gefördert von der Volkswagen Stiftung (Forschungskooperation Niedersachsen-Israel)

Projekt NANOPOL:

Polarisationempfindlicher Wellenfrontsensor auf Basis von Nanogittern zur Charakterisierung thermischer Aberration in Hochleistungs-Laseroptiken, gefördert vom BMBF (Photonik Plus)

Projekt NesSi - SÜLa:

Brandfrühwarn- und Schutzsystem für das Überwachen von Lithiumakkumulatoren, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt NesSi - InGesWoh:

Sensorik und Gütekriterium für die Raumluftqualität, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt NEXAFS:

Laboratory-scale NEXAFS spectroscopy for the investigation of Fe oxides and organic matter in soil, gefördert von der DFG

Projekt OMeGlas.3:

Erforschung eines schnellen, sensitiven Verfahrens zur Oberflächen- und tiefenselektiven Messung der Spannung von Verbundgläsern, gefördert vom BMBF (KMU-innovativ)

Projekt PaSiReRa:

Weiterentwicklung und Validierung einer Analysevorrichtung zur Überwachung von Infusionslösungen und anderen Medikationen auf Grundlage der Ramanspektroskopie und der Refraktometrie, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt PicoLas:

Pikosekundenlasergestützte Strahlquelle für die EUV-Messtechnik, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt PPA-FiRa:

Entwicklung einer Gasküvette auf Basis photonischer Kristallfasern zur Raman-Messung an Gasen, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekt ProWave:

Propagation partiell kohärenter Strahlung von FELs basierend auf Hartmann-Wellenfrontmessungen, gefördert vom BMBF (Materie PT-DESY)

Projekt Ra_Nerv:

Exploring advanced Raman microscopy as a tool to Localize and Quantify Metabolites in Neural tissue, gefördert von der Volkswagen Stiftung (Kurswechsel)

Projekt Z-shifter:

Z-shifter zur diffraktiven Beschriftung gekrümmter Werkstoffflächen, gefördert vom BMWi (ZIM)

Projekte

Projects

Projekt Rubin-SniPoCC:

Südniedersachsen Point of Care Cluster, Erfassung des Endwicklungsbedarfs und Konzeption von Projektideen für innovative Schnelltests, gefördert vom BMBF (Innovation & Strukturwandel)

Projekt sharpSTED-Mikroskopie:

Weiterentwicklung der STED-Mikroskopie mit struktur- und helligkeitsunabhängiger Aberrationskorrektur in realen Proben, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt SiKoPla:

Laserbasierte Methoden zur Steigerung der Photolumineszenz von Si-Quantenpunkten durch Kopplung an plasmonische Partikel, gefördert von der DFG

Projekt Smart STED-Mikroskopie:

Superresolution microscopy with smart and sample-specific scanning patterns, gefördert von der DFG (Exzellenzclusters 2067 Multiscale Bioimaging)

Projekt SpannForm (bis 28.02.2021):

Kontinuierliche Freiformoberflächen durch laserinduzierte Modifikation schichtspannungsinduzierter Verformung, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt Spectacular (bis 30.06.2021):

Spektrale Verbreiterung von Hochleistungspulsen in gestreckten Hohlfasern, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt Sub-100nm (bis 31.10.2021):

Erzeugung deterministischer Nanostrukturen durch ultrakurze UV-Pulse unter vordefinierten Grenzflächenbedingungen: Theorie und Experiment, gefördert von der DFG

Projekt TITULUS:

Translation der Interferenzenebene zur diffraktiven Beschriftung mit ultrakurzen Laserpulsen bei unebenen Werkstückflächen, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt ToxAR:

Analyse von Senfgas unter Berücksichtigung eines sicheren Probenumgangs und TNT-Sensor für Taucher und ROV/AUV, gefördert vom BMWi (Maritimes Forschungsprogramm)

Projekt TomoSTED-Mikroskopie:

Hochauflösende Fluoreszenzmikroskopie bei reduzierter Lichtdosis und unverminderter Bildqualität, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Projekt WeKokUbs:

Wellenfront- und Kohärenzkontrolle an Undulatorbasierten Strahlquellen zur Optimierung bildgebender Verfahren, gefördert vom BMBF (Erforschung kondensierter Materie an Großgeräten)

Projekt WIPANO GlasForm:

Lasergestützte Glasbehandlung zur Formkorrektur von Substraten, gefördert vom BMWi (WIPANO)

Publikationen

Publications

J. Holburg, M. Müller, K. Mann:

Improved gas-jet based extreme ultraviolet, soft X-ray laser plasma source, *Optics Express* 29, 6620-6628 (2021)

F. Diao, W. Huang, G. Ctistis, H. Wackerbarth, Y. Yang, P. Si, J. Zhang, X. Xiao, C. Engelbrekt:

Bifunctional and Self-Supported NiFeP-Layer-Coated NiP Rods for Electrochemical Water Splitting in an Alkaline Solution, *ACS Applied Materials and Interfaces* 13 (20), 23702 (2021)

C. Niklas, H. Wackerbarth, G. Ctistis:

A Short Review of Cavity-Enhanced Raman Spectroscopy for Gas Analysis, *Sensors* 21, 1698 (2021)

Y. AlSalka, O. Al-Madanat, A. Hakki, D. W. Bahnemann:

Boosting the H₂ Production Efficiency via Photocatalytic Organic Reforming: The Role of Additional Hole Scavenging System, *Catalysts* 1 (12), 1423 (2021)

H. Wackerbarth, C. Lenth, G. Ctistis, F. Wieduwilt, N. Konradt:

Bestimmung von Benzotriazol in Gewässern mit plasmonischer on-site Analytik, *GdCh – Mitt Umweltchem Ökotox* 4,

P. Simon, J. Ihlemann, J. Bonse:

Editorial: Special Issue Laser-Generated Periodic Nanostructures, *Nanomaterials* 11, 2054 (2021)

C. M. Beckmann, J. Ihlemann:

Figure correction of borosilicate glass substrates by irradiation with an ArF excimer laser for production of precisely shaped reflective optics, *DGaO-Proceedings 2021*, ISSN: 1614-8436 (2021)

K. Soliman, F. Grimm, C. A. Wurm, A. Egner:

Predicting the membrane permeability of organic fluorescent probes by the deep neural network based lipophilicity descriptor DeepFI-LogP, *Scientific Reports* 11 (1), 6991 (2021)

R. Siegmund, F. Werner, S. Jakobs, C. Geisler, A. Egner:

isoSTED microscopy with water-immersion lenses and background reduction, *Biophysical Journal* 120, 1 - 12 (2021)

J. Oltmanns, P.N. Terekhin, F. Kleinwort, A. Blumenstein, D.S. Ivanov, M.E. Garcia, B. Rethfeld, J. Ihlemann, P. Simon:

Influence of the Laser Beam Shape on Laser-Induced Periodic Surface Structure Formation Assisted by Surface Plasmon Polaritons, *JLMN-Journal of Laser Micro/Nanoengineering* 16 (3), 199 (2021)

Buchbeiträge

Book Contributions

P. Simon, J. Ihlemann, J. Bonse:

Laser-Generated Periodic Nanostructures,
Pages: 340, Published: October 2021,
ISBN 978-3-0365-2027-8 (Hbk); ISBN 978-3-0365-
2028-5 (PDF)



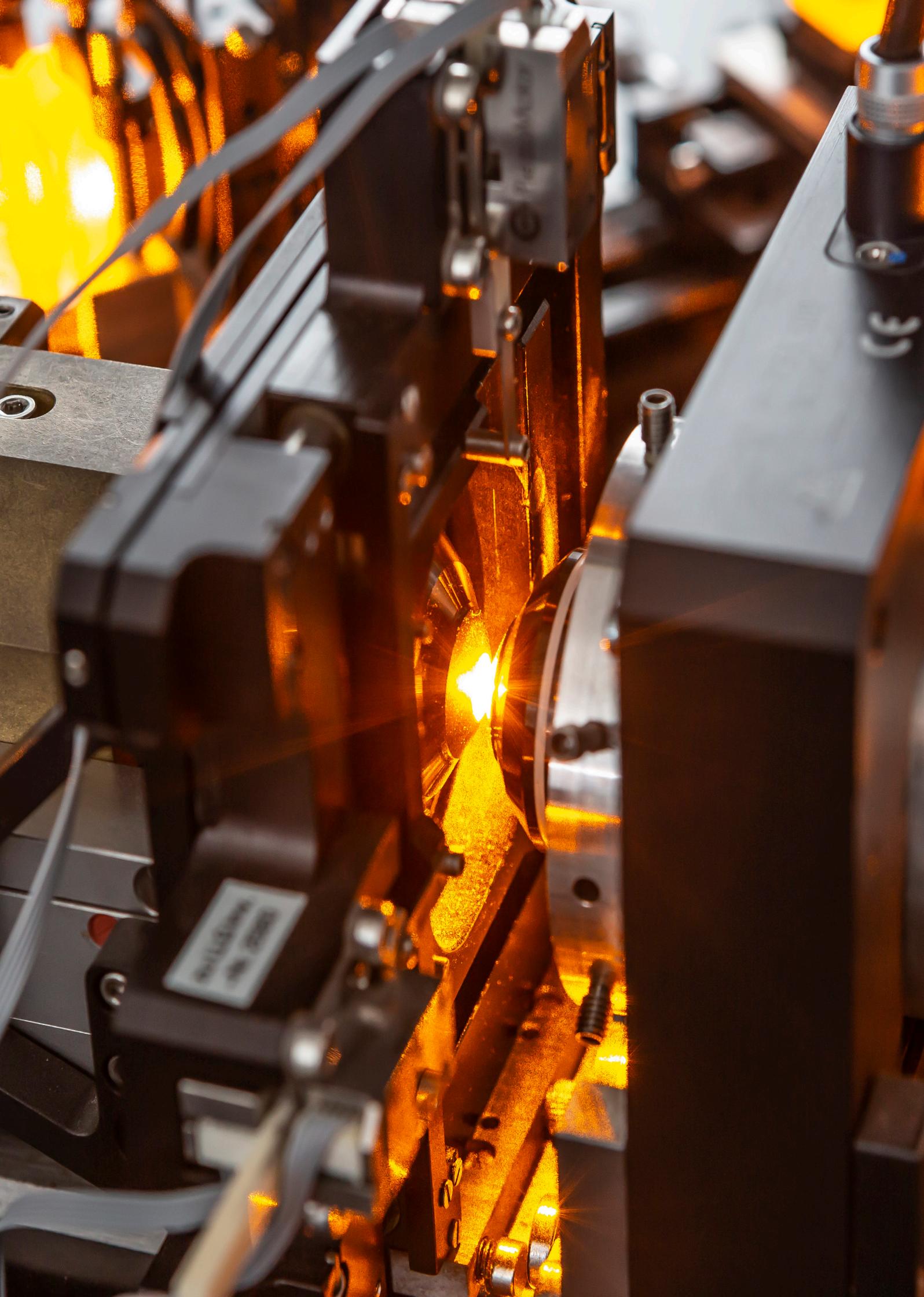
Patente

Patents

J. Ihlemann, J. Meinertz, L. H. Stark:

Ablative production device and method for a
periodic line structure on a workpiece
US 11,059,127 B2, 13.7.2021





Konferenzbeiträge

Conference contributions

J. Kratz, C. Geisler, A. Egner:

ISM-Assisted Tomographic STED Microscopy Allows for Sample-Gentle Super-Resolution Imaging, 65th Biophysical Society Annual Meeting 2021, virtual (02.2021)

J. Kratz, C. Geisler, A. Egner:

ISM-Assisted Tomographic STED Microscopy Allows for Sample-Gentle Super-Resolution Imaging, Focus on Microscopy 2021, virtual (03.2021)

E. Shestaev, S. Hädrich, N. Walter, T. Nagy, P. Simon, A. Blumenstein, A. Klenke, R. Klas, J. Buldt, H. Stark, M. Gebhardt, S. Breitkopf, C. Gaida, P. Jójárt, I. Seres, Z. Várallyay, Á. Börzsönyi, T. Eidam, J. Limpert:

CEO-stable pulses from a 1kW fiber, SPIE LASE 2021, virtual (03.2021)

P.N. Terekhin, J. Oltmanns, A. Blumenstein, D.S. Ivanov, F. Kleinwort, M.E. Garcia, B. Rethfeld, J. Ihlemann, P. Simon:

Design of periodic structures by surface plasmon polaritons excitation, DPG-Spring meeting on Surface Science, virtual (03.2021)

C. Lenth, M. Dinse, A. Schumann:

Brandfrühwarnsystem auf Basis der Ionenmobilitätsspektrometrie für Lithium-Ionen-Akkumulatoren - 8. IMS Anwendertreffen, Potsdam (03.2021)

B. Kratz, F. Wieduwilt, M. Saveliev, C. Javelle:

Methods and components to mitigate the radioactive aerosol contamination risks for the Chernobyl NSC, Sixth International Conference on Nuclear Decommissioning and Environment Recovery – INU-DECO 2021, Slavutych, Ukraine (04.2021)

J. Oltmanns, P.N. Terekhin, D.S. Ivanov, A. Blumenstein, F. Kleinwort, M.E. Garcia, B. Rethfeld, J. Ihlemann, P. Simon:

Investigation of the plasmonic nature of laser-induced periodic surface structures, The 22nd International Symposium on Laser Precision Microfabrication (LPM 2021), virtual (06.2021)

B. Kratz, F. Wieduwilt, M. Saveliev:

Pillars for establishing a durable and future-proof IT architecture maturing along with the NSC: Approaches from Continuous Integration to Service Mesh, Mathematical Modeling and Simulation of Systems – MODS 2021, Chernihiv, Ukraine (06.2021)

P. Jain, V. Udachin, S. Nagorny, C. Geisler, J. Adams, A. Schmidt, C. Rembe, A. Egner:

High resolution reflection microscopy via absorbance modulation, Microscience Microscopy Congress 2021, virtual, (07.2021)

A. Egner:

Smart solutions for fluorescence nanoscopy, Hertha Sponer College Lecture Series of the MBExc, Göttingen (07.2021)

C. Gregor:

Autonomous bioluminescence imaging of single cells, 16th Annual Meeting of the European Society for Molecular Imaging – EMIM 2021, Göttingen (08.2021)

L. Fütterer, C. Beckmann, J. Ihlemann:

Viscoelastic deformation of glass substrates by laser patterned stressed films, DPG-Workshop Applied photonics, Bad Honnef (09.2021)

Konferenzbeiträge

Conference contributions

L. J. Richter, J. Ihlemann:

Laser-based methods for luminescence enhancement of Si-nanocrystals by coupling to plasmonic nanoparticles, DPG-Workshop Applied photonics, Bad Honnef (09.2021)

P. N. Terekhin, F. Kleinwort, J. Oltmanns, A. Blumenstein, D.S. Ivanov, M.E. Garcia, J. Ihlemann, P. Simon, B. Rethfeld:

Evidence of plasmonic nature of self-arranged surface nanostructuring after single femtosecond laser pulse irradiation, DPG-Workshop Applied photonics, Bad Honnef (09.2021)

C. M. Beckmann, J. Ihlemann:

Formkorrektur von Borosilikatglassubstraten durch Bestrahlung mit einem ArF-Excimerlaser zur Herstellung formgenauer reflektierender Optiken
122. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für angewandte Optik (DGaO), Bremen (09.2021)

P. N. Terekhin, J. Oltmanns, A. Blumenstein, D.S. Ivanov, F. Kleinwort, M.E. Garcia, J. Ihlemann, P. Simon, B. Rethfeld:

Ablative versus nonablative laser-induced periodic surface structures, International Conference on Ultrafast Optical, Science, Moscow, Russia (10.2021)

F. Wieduwilt, J. Grünewald, H. Wackerbarth:

Evaluation of an optical multisensor system for monitoring pharmaceuticals in hospital and pharmacy environments, CINSaT autumn colloquium 2021, Kassel (11.2021)

M. Bates:

Isotropic 3D Fluorescence Nanoscopy with 4Pi-STORM, Photonic Net - Forum MikroskopieTrends '21, Göttingen, virtual (12.2021)

C. Beckmann:

Formkorrektur von Borosilikatglassubstraten durch Bestrahlung mit einem ArF-Excimerlaser zur Herstellung formgenauer reflektiver Optiken, Workshop Laserbearbeitung von Glaswerkstoffen, virtual (12.2021)

Abschlussarbeiten

Final Thesis

Jan Lukas Langer

Charakterisierung von SERS-Substraten mittels konfokaler Raman-Mikroskopie,

Bachelorarbeit, HAWK Hochschule für angewandte Wissenschaft und Kunst (09.2021)

Christian Grünewald

Evaluation von Metalloxid-Halbleiter-Gassensorenarrays zur Detektion von Carbonsäureester als Ausgasprodukt eines havariierenden Lithium-Ionen-Akkumulators,

Bachelorarbeit, HAWK Hochschule für angewandte Wissenschaft und Kunst (11.2021)

Jasmin Grünewald

Evaluation verschiedener Sensoren für ein Multi-Sensor-System zur Überwachung von Infusionslösungen,

Bachelorarbeit, HAWK Hochschule für angewandte Wissenschaft und Kunst (11.2021)

Yuwen Peng

Evaluation of surface enhanced Raman spectroscopy for the analyses of benzotriazole in aqueous samples,

Bachelorarbeit, Georg-August-Universität Göttingen (12.2021)

Lenny Reinkensmeier

Kontrasterhöhung in der STED-Mikroskopie durch Entfernung defokussierter Signalanteile,

Masterarbeit, Georg-August-Universität Göttingen (03.2021)

Hendrik Wrigge

Breitband-Pump-Probe-Aufbau zur zeitaufgelösten Messung des Reflexionsvermögens an Metallen und Halbleitern,

Masterarbeit, Georg-August-Universität Göttingen (03.2021)

Clemens Beckmann

Elastic and viscoelastic deformation of glass plates by excimer laser induced stresses and patterned silicon suboxide films,

Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen (09.2021)

Julia Kratz

New Concepts for STED Microscopy,

Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen (10.2021)

Ausgewählte Kooperationspartner Selected Cooperation Partners

INTERNATIONAL



NATIONAL



LOKAL



WISSENSCHAFT LÖSUNGEN



ZUSE-GEMEINSCHAFT
FORSCHUNG, DIE ANKOMMT.

Zuse-Gemeinschaft als starker Transferpartner Jahresrückblick 2021

Unser Institut gehört neben rund achtzig weiteren Forschungseinrichtungen der Deutschen Industrieforschungsgemeinschaft Konrad Zuse e.V. an. Die Zuse-Gemeinschaft ist ein branchenübergreifender, außeruniversitärer und technologieoffener Forschungsverbund. Als gemeinnütziger, praxisnaher Transferpartner von Unternehmen übersetzt er Erkenntnisse der Wissenschaft in anwendbare Technologien.

Das Jahr 2021 war - neben der Corona-Pandemie – von der Bundestagswahl geprägt, politische Kommunikation daher ein beherrschendes Thema in unserem Verband. Viele Mitgliedsinstitute der Zuse-Gemeinschaft öffneten ihre Türen für lokale Vertreter der Politik und stellten ihre erfolgreichen Transferprojekte und Innovationen vor.

Am 1. Dezember konstituierte sich der Senat der Zuse-Gemeinschaft neu: Eine Woche zuvor hatte die Mitgliederversammlung der Zuse-Gemeinschaft die MdB Yasmin Fahimi (SPD), MdEP Nicola Beer (FDP), MdB Melis Sekmen (Bündnis 90/Die Grünen), MdB Antje Tillmann (CDU) und MdB Dr. Petra Sitte (DIE LINKE) in den Senat gewählt. Dem maßgeblichen Beratungsgremium der Zuse-Gemeinschaft gehören 19 Mitglieder an, davon fünf Vertreterinnen und Vertreter aus Bundestag und Europäischem Parlament. Unter den Vertretern der Wirtschaft wurde Paavo Günther vom Unternehmen Havelmi und Michael Münch von der Firma SONOTEC neu in den Senat gewählt.

Die beiden Förderprogramme „Innovationskompetenz INNO-KOM“ und Industrielle Gemeinschaftsforschung (IGF) des Bundeswirtschaftsministeriums durchliefen im Jahr 2021 eine überaus erfolgreiche Evaluierung. Die Richtlinien sind wichtige Instrumente der Forschungs- und Innovationsförderung in Deutschland. Die Zuse-Gemeinschaft tritt für die bundesweite Öffnung des Förderprogramms INNO-KOM ein, weil Innovationen meist in überregionaler Kooperation verwirklicht werden. Dies bestätigen auch die Evaluierungsergebnisse.

Die Bioökonomie gewinnt als eines von mehreren wichtigen Forschungsfeldern in der Zuse-Gemeinschaft immer mehr an Gewicht. So wuchs der Cluster Bioökonomie des Verbandes mit dem Beitritt der Versuchs- und Lehranstalt für Brauerei in Berlin (VLB) e.V. auf nunmehr 20 Mitglieder an. Unter dem Leitmotiv „Forschen mit der Natur“ arbeiten die Mitglieder des Clusters Bioökonomie als informeller Zusammenschluss unter dem Dach des Verbandes an der Lösung zentraler gesellschaftlicher und wirtschaftlicher Aufgaben. Die Bioökonomie umfasst in der Zuse-Gemeinschaft branchenübergreifend die Aktivitäten zur Nutzung biologischer Ausgangsstoffe und deren Produkte von der Bereitstellung und Aufbereitung von Rohstoffen über die Entwicklung von Verfahren und Produkten bis hin zur Verbreitung von Wissen und Dienstleistungen.

Weitere Informationen finden Sie unter:

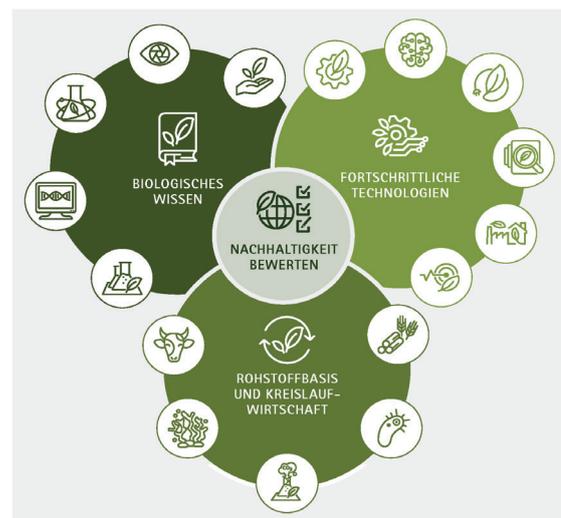
www.zuse-gemeinschaft.de · twitter.com/Zuse_Forschung



Olaf Scholz zu Besuch in der SLV Halle.
Bildquelle: SLV Halle.



Nicola Beer am DECHEMA-Forschungsinstitut.
Bildquelle: DECHEMA e.V..



Die Kompetenzen im Cluster Bioökonomie der Zuse-Gemeinschaft. Nachhaltigkeit steht im Zentrum. Grafik: Zuse-Gemeinschaft.