

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium  
für Bildung  
und Forschung

## Schlussbericht

Verbund: nein

Zuwendungsempfänger: Humboldt-Universität zu Berlin  
Projektleitung: Prof. Dr. Janina Kneipp  
E-Mail: janina.kneipp@chemie.hu-berlin.de  
Förderkennzeichen: 05K19KH1  
Förderzeitraum: 01.07.2019 - 30.11.2023  
Zuwendung: 1.027.384,54 €  
Projektträger: Projektträger DESY  
  
Zusätzlicher Kontakt: olga.keil@uv.hu-berlin.de  
Zusätzlicher Name: Olga Keil

Genutzte Großgeräte:	Labor	Gerät	Experiment
	HZB	BESSY II	
Diplomarbeiten:	0		
Dissertationen:	2		
Habilitationen:	0		
Referierte Publikationen:	7		
Andere Veröffentlichungen:	17		
Patente:	0		
Bachelorarbeiten:	0		
Masterarbeiten:	0		
Staatsexamen:	0		

Dieser Bericht wurde beim Projektträger über einen individuellen Online-Zugang vom Projektleiter eingereicht und am 19.06.2024 15:06 für eine Veröffentlichung freigegeben.

# Schlussbericht

Zuwendungsempfänger:	Humboldt-Universität zu Berlin
Projektleitung:	Prof. Dr. Janina Kneipp
Verbund:	Humboldt-Universität zu Berlin, Kooperationspartner: Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Thema:	Größenskalen in der molekularen Bildgebung verbinden: Eine Synchrotron-Mikroskopiestation für räumliche, zeitliche und polarisationsaufgelöste Schwingungsspektroskopie

## Zusammenfassung

Das technische Ziel von SyMS war die Realisierung eines empfindlichen Schwingungsmikroskopie-Setups, das über einen breiten Bereich lateraler Auflösungen arbeitet und den Zugriff auf sehr unterschiedliche Skalen der Probenheterogenität ermöglicht, von einzelnen (Makro-)Molekülen bis hin zu mikroskopischen Objekten.

Der aktuelle Aufbau des IR-Strahlrohrs bei BESSY II umfasst vier verschiedene Endstationen, die eine verbesserte Charakterisierung von Molekülen und Materialien auf unterschiedlichen Längenskalen und Zeitaufösungen ermöglichen. Vergleichbare experimentelle Kapazitäten sind weltweit nur an einer sehr begrenzten Anzahl von IR-Strahlrohren verfügbar. Durch die Kombination des verfügbaren Spektralbereichs (von THz bis mittlerem Infrarot) und der Endstationen für Makro-, Mikro- und Nanospektroskopie steht das Strahlrohr bei BESSY II mit dem jetzt erfolgreich abgeschlossenen Projekt SyMS auf einer Stufe mit den derzeit führenden IR-Strahlrohren weltweit. Zudem ermöglicht das IRIS-Strahlrohr bei BESSY II einzigartige *single-shot*-IR-Spektroskopie-Experimente und fügt so die erforderliche Zeitdimension zur Charakterisierung irreversibler Prozesse mittels IR-Spektroskopie hinzu. Alle Projektziele sind erreicht worden, im Nachgang des Projekts erfolgt allerdings noch eine weitere Optimierung der experimentellen Aufbauten, insbesondere der weiteren Strahloptimierung durch den Kooperationspartner HZB und die Verbesserung der Integration des Raman-Aufbaus.

Die neue Mikroskopiestation wird seit ihrer Inbetriebnahme im Jahr 2022 von einer breiten Nutzergemeinschaft in kompetitiven Vergabeverfahren gebucht. Die Mikroskopiestation wird einen wesentlichen methodischen Standortvorteil für viele wichtige Verbünde liefern. Die bisher dort stattfindenden Projekte sind in den unterschiedlichen Gebieten der Materialforschung, der Katalyse und Energieerzeugung, aber auch in der Anwendung zur Untersuchung von Kulturgütern und Kunstschätzen, sowie in den Lebenswissenschaften und in einem Projekt aus den Agrarwissenschaften angesiedelt.

# Bericht

## 1 Aufgabenstellung und Voraussetzungen, unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das technische Ziel von SyMS war die Realisierung eines empfindlichen Schwingungsmikroskopie-Setups, das über einen breiten Bereich lateraler Auflösungen arbeitet und den Zugriff auf sehr unterschiedliche Skalen der Probenheterogenität ermöglicht, von einzelnen (Makro-)Molekülen bis hin zu mikroskopischen Objekten. Dies wird durch die Kombination von beugungsbegrenzter Mittelinfrarotmikroskopie (mit einer Auflösung von ~5-10  $\mu\text{m}$ ) mit Raman-Streuung im sichtbaren Bereich (mit einer Auflösung von 300-500 nm) gewährleistet. SyMS wurde in einer Kooperation der HU mit Wissenschaftlerinnen am HZB-BESSY II, die seit 2001 das Strahlrohr IRIS betreiben, umgesetzt. Dies ermöglichte eine mechanische, optische, Software- und Vakuum-Schnittstelle aller Mikroskopie-Setups am Infrarot-Strahlrohr zu realisieren. Die mechanische Auslegung der für die Mikroskopiestation notwendigen Strahlrohrmodifikationen wurden mit den Engineering-Tools des HZB entworfen.

## 2 Wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Die Mikroskopiestation wurde an ein bestehendes Strahlrohr gebaut, hier wurde mit Blick auf die optische und mechanische Station an ein „gewachsenes“ Know-how und Expertise entsprechend angeknüpft. Der Brillanzvorteil von Synchrotronquellen im IR-Bereich ist seit den 1980er Jahren bekannt, und heute verfügen die meisten Synchrotrons über eine IR-Strahllinie. Die hohe Helligkeit ermöglicht die Erfassung von IR-Mikrospektren mit hohem Signal-Rausch-Verhältnis und einer lateralen Auflösung an der Beugungsgrenze des IR-Lichts, bis hinunter zu Punktgrößen von 5  $\mu\text{m}$  x 5  $\mu\text{m}$ . Bilder von Synchrotron-IR-Mikrospektren basieren auf allen in den Spektren enthaltenen chemischen Informationen, die entweder durch Rasterabtastung Punkt für Punkt oder mit Focal-Plane-Array-(FPA)-Bilddetektoren erfasst werden, bei denen bis zu 128 x 128 Spektren gleichzeitig erfasst werden. Dies hat neue Einblicke in viele Forschungsbereiche gebracht, insbesondere bei komplexen mikrostrukturierten Proben biologischen Ursprungs, wie etwa lebenden Zellen. Sowohl die HU PI als auch die Wissenschaftler\*innen am IRIS waren in den letzten zwei Jahrzehnten an den Entwicklungen der Synchrotron-IR-Mikroskopie beteiligt. Die Vorarbeiten reichen vom Bau der Ausrüstung für die IRIS-Strahllinie und weitere Strahllinien der Partner am HZB-BESSY bis hin zu IR-Bildgebungsstudien biologischer Proben an verschiedenen IR-Strahllinien weltweit, einschließlich des ersten Nachweises fehlgefalteter Prionproteine in situ oder Mikrospektren von Pflanzengewebe. Spezifische Anwendungen umfassen die Mikroskopie von Mineralien bei hohem Druck und die Nutzung des Schwingungslinardichroismus. Die Vibrationslinardichroismus-Mikrospektroskopie liefert neben hoher räumlicher Auflösung und Strukturinformationen Informationen über sich entwickelnde Konformationsänderungen und Orientierungen in Proben, wie Polymeren oder Festkörperproben.

## 3 Planung und Ablauf des Vorhabens sowie Kooperation mit Dritten

Die neue Mikroskopiestation wird seit ihrer Inbetriebnahme im Jahr 2022 von einer breiten Nutzergemeinschaft in kompetitiven Vergabeverfahren gebucht. Die Mikroskopiestation wird einen wesentlichen methodischen Standortvorteil für viele wichtige Verbünde liefern, insbesondere einen kürzlich neu ins Leben gerufenen DFG-Sonderforschungsbereich (DFG-SFB 1636, Uni Potsdam, HU Berlin). Mehrere der bisher stattfindenden Projekte werden von Mitgliedern des Exzellenzclusters UniSysCat durchgeführt.

#### **4 Verwendung der Zuwendung (wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises, z. B. Investitionen, Personalmittel)**

Die Zuwendung wurde für die Beschäftigung eines erfahrenen Wissenschaftlers im Postdoktorat, Dr. Alexander Veber, verwendet. Er war für die Planung und die experimentelle Umsetzung von der Optimierung des Strahls bis zur Installation, Inbetriebnahme, sowie sämtlicher Messungen im Projekt zuständig. Weitere Kosten im Projekt beliefen sich auf Verbrauchsmittel und Zubehör für die beschafften Großgeräte, wie z.B. eine Laserquelle für die zu integrierenden Ramanspektroskopie-Experimente, Etablierung einer Probenvorbereitung (Kühlung, Thermostatisierung), Messzellen, Charakterisierung von Nanomaterialien, Lichtquellen etc. verwendet. Als Großgeräte wurden wie geplant ein IR-Mikroskop (Bruker), sowie ein Raman-taugliches Mikroskop (attocube) sowie Lichtquellen beschafft.

#### **5 Erzielte Ergebnisse mit Gegenüberstellung der vereinbarten Ziele**

Aufgrund eines Hacker-Angriffs auf das HZB im Juni 2023 kamen die Experimente des gesamten Synchrotrons in den Strahlzeit-Perioden 2/2023 und 1/2024 bis auf wenige Ausnahmen zum Erliegen, dennoch wurde ab Ende 2023 der für Nutzer\*innen (bis heute) eingeschränkte Betrieb des Synchrotrons bestmöglich für die Weiterentwicklung der Mikroskopie-Station genutzt. Daher steht die bisherige Publikationstätigkeit durch die externen Nutzer\*innen aus Kooperationen im letzten Arbeitspaket leicht zurück, wird/wurde aber nach Projektabschluss weiter fortgesetzt.

Alle Projektziele sind erreicht worden, im Nachgang des Projekts erfolgt allerdings noch eine weitere Optimierung der experimentellen Aufbauten, insbesondere der weiteren Strahloptimierung durch den Kooperationspartner HZB und die Verbesserung der Integration des Raman-Aufbaus. Im Rahmen des SyMS-Projekts wurde das optische Schema der Strahllinie sorgfältig analysiert, um die Qualität des Strahls und den Fluss an den Endstationen zu verbessern. Aufgrund der Ergebnisse wurde beschlossen, den Extraktionsspiegel der Strahlführung durch einen neu entwickelten Spiegel auszutauschen, der eine kleinere Schlitzgröße haben wird (3 mm gegenüber derzeit 6 mm). Dies wird es ermöglichen, das Infrarotlichtsignal an allen Endstationen der Strahllinie deutlich zu verstärken, insbesondere im Bereich von 1000–4000  $\text{cm}^{-1}$  wird die Lichtintensität um ca. 10 % zunehmen. Das neue monolithische Design des Spiegels soll die Qualität des extrahierten Strahls verbessern. Die Änderung wird im Juli-August 2024 durchgeführt.

Der Raman-Teil basiert auf einem 659,6-nm-Einzelfrequenzlaser. Diese Wellenlänge ermöglicht die Verwendung der goldbeschichteten Optik, die im IR-Mikroskop verwendet wird. Die Verwendung des Einzelfrequenzlasers ermöglicht die Erfassung von Raman-Streuspektren im Spektralbereich bis hinunter zu 4  $\text{cm}^{-1}$  unter Verwendung von Notchfiltern mit ultraschmalen Band. Ein 300-mm-Czerny-Turner-Monochromator mit Ag-beschichteten optischen Spiegeln und entsprechendem Gittersatz sowie die gekoppelte CCD-Kamera mit niedrigem Dunkelstrom, optimiert für die Wellenlängen 660–920 nm wird es ermöglichen, gleichzeitig mit den FTIR-Spektren Raman-Spektren im Bereich von 4–2000  $\text{cm}^{-1}$  zu messen.

#### **6 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit**

Die Angemessenheit der für den Aufbau der neuartigen Mikroskopie-Station zeigt sich in den im letzten Projektjahr angelaufenen Anwendungsprojekten durch die Nutzer\*innen des Synchrotrons, die während der Projektlaufzeit 19 Projekte beantragt haben, weitere 9 kamen im ersten Halbjahr 2024 hinzu. Antragstellende und Themen der bewilligten Anträge sind wie folgt (chronologisch):

Elbaum, Rivka- The Hebrew University of Jerusalem- Plant bio-silica formation at small scales: The mineralization of a peptide from Siliplant1 studied by IR-nanospectroscopy

Palmer, Ben- Ben-Gurion University of the Negev, Israel-Guanine Crystal Formation and Dissolution in Microalgae

Lemcoff, Tali- Ben-Gurion University of the Negev, Israel- Investigating the Nanoscale Spatial Distribution of Additives in Biogenic Guanine Crystals

Lounasvuori, Mailis-HZB- Probing the hydration shell of cations in single MXene flakes by infrared nanospectroscopy

Kneipp, Janina, HU- Infrared nanospectroscopy of native cellular nuclei

Veber, Alexander, HZB- Enabling in-liquid infrared nano-spectroscopy and imaging of soft materials

Ortolani, Michele- University of Rome "La Sapienza- Conformational changes of the slow Bacteriorhodopsin mutant D96N measured by nearfield infrared spectroscopy

Heiner, Zsuzsanna-HU- Infrared nano spectroscopy and imaging of a model PAS-domain protein at protein interfaces in action: a structural model for signal transduction

Horch, Marius-FU Berlin- Probing the Cellular Distribution of a [NiFe] Hydrogenase by IR Nanospectroscopy

Zaslansky, Paul, Charité, Berlin- nanoFTIR mapping of apatite mineral clusters in bovine teeth: relating macroscopic KKT reflectanceFTIR to the micron sized hypermineralized tubules in tooth dentine

Pinto, Javier, ES, Universidad de Valladolid, Spain-Measurement of the nanostructuring in PMMA/MAM blends and the effect of pore size in the molecular confinement of polymeric chains in nanoporous materials using nano IR

Cardinaels, Ruth, BE, Eindhoven University of Technology, Netherlands- Unraveling nanoscale stereocomplex crystallization at the interface of immiscible polymer blends

Ortolani, Michele, IT, University of Rome "La Sapienza", Italy- Infrared micro-spectroscopy of pure and RNA-bound alpha-synuclein aggregates

Garvey, Christopher-Research Neutron Source Heinz Maier-Leibnitz (FRM II) Technische Universität München-Evolution and spatial distribution of crystallinity in biodegradable polymer blends during uniaxial extension.

Kneipp, Janina, HU- Characterizing structure and molecular composition of the nucleolus by near-field infrared spectroscopy

Veber, Alexander, HU- Orientation of individual cellulose microfibrils in plant cell walls at the sub-micron scale from IR-nanospectroscopy

Schönemann, Anna, University of Applied Sciences Berlin- FTIR-investigation of European Lacquer, a historic art technology, for a conservation project of the Stiftung Preußische Schlösser und Gärten Berlin-Brandenburg

Jordao, Luisa Jordao- Instituto Nacional de Saúde Doutor Ricardo Jorge- Portugal- Exploring the potential synergy of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and microplastics (MPs) toxicity for humans using HepG2 cells as a model.

Puskar, Ljiljana, HZB- IR nanoimaging of metal coordinated nanostructured self-assembled fibrous materials- NEASPEC

Ortolani, Michele, University of Rome "La Sapienza" -Mid-infrared microspectroscopy and nanospectroscopy of the aggregation pathway of DNA-binding-proteins

Kneipp, Janina, HU-Near-field infrared spectra from subcellular structures: Plasmonic nanoparticles in cells

Kutzke, Hartmut, University of Oslo, Museum of Cultural History-Department of Conservation-

Sandu, Irina- Munchmuseet, Oslo -Characterisation of real paint samples from Edvard MUNCH's collection of paintings by high precision SRFTIR spectroscopic data in the FAR and MID-IR region

van Breemen, Lambèrt- Eindhoven University of Technology- Netherlands- Nanoscale identification of compatibilized polymer composites: the role of maleic anhydride on the nucleation and growth of polypropylene crystals

Kneipp, Janina, HU- In situ imaging of cellulose fibrils local orientation in plant secondary cell walls

de Ligny, Dominique, FAU Erlangen-Nürnberg, Infrared investigation of structural changes in glass submitted to very strong plastic deformation around glass transition temperature

Kutzke, Hartmut-University of Oslo, Museum of Cultural History-Department of Conservation Studying dyestuffs and metal-organic compounds occurring in medieval recipes by synchrotron-based infrared microscopy

van Breemen, Lambèrt- Eindhoven University of Technology- Netherlands- Structure evolution in polymer composites: in-situ monitoring of deformation kinetics at the fiber/matrix interphase.

Kneipp, Janina, HU Fine structure of cellulose microfibrils from IR-nanospectroscopy

## 7 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse

Die bisher dort stattfindenden Projekte sind in den unterschiedlichen Gebieten der Materialforschung, der Katalyse und Energieerzeugung, aber auch in der Anwendung zur Untersuchung von Kulturgütern und Kunstschätzen, sowie in den Lebenswissenschaften und in einem Projekt aus den Agrarwissenschaften angesiedelt. Daher ist neben den entstehenden Publikationen auch eine Verwertbarkeit der Ergebnisse im Rahmen von Patenten, sowie im öffentlichen Bereich auf nationaler und internationaler Ebene zu rechnen. Die Wissenschaftler\*innen kommen aus dem internationalen Umfeld, sowie aus großen Verbundprojekten (SFBs, Exzellenzcluster am Wissenschaftsstandort Berlin-Potsdam). Es besteht eine Zusammenarbeit mit Graduiertenprogrammen, die die Ausbildung von Promovierenden und Postdoktorand\*innen gezielt fördert.

Die Aufrüstung der Synchrotronanlagen der dritten Generation (Soleil, ELLETRA, Diamond, ALS) auf Quellen der vierten Generation wird einen erhöhten Bedarf der Nutzergemeinschaft an dem im Projekt SyMS aufgerüsteten IRIS-Strahlrohr @ BESSY II erzeugen und die weitere Entwicklung der Anlage erleichtern. Die gewonnenen ingenieurtechnischen, technischen und analytischen Entwicklungen sowie die neue, einzigartige Ausstattung werden zudem eine reibungslose Übertragung des IRIS-Strahlrohrs auf einen neuen BESSY III-Speicherring der vierten Generation ermöglichen, der derzeit in Planung ist.

## 8 Während der Durchführung des Vorhabens dem Zuwendungsempfänger bekannt gewordenen Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Der aktuelle Aufbau des IR-Strahlrohrs bei BESSY II umfasst vier verschiedene Endstationen, die eine verbesserte Charakterisierung von Molekülen und Materialien auf unterschiedlichen Längenskalen und Zeitaufösungen ermöglichen. Vergleichbare experimentelle Kapazitäten sind weltweit nur an einer sehr begrenzten Anzahl von IR-Strahlrohren verfügbar. Durch die Kombination des verfügbaren Spektralbereichs (von THz bis mittlerem Infrarot) und der Endstationen für Makro-, Mikro- und Nanospektroskopie steht das Strahlrohr bei BESSY II mit dem jetzt erfolgreich abgeschlossenen Projekt SyMS auf einer Stufe mit den derzeit führenden IR-Strahlrohren, darunter SMIS bei Soleil, Frankreich; MIRIAM bei Diamond, UK; 1,4-, 2,4- und 5,4 bei ALS, USA; MET- und FIS- bei NSLS II, USA. Zudem ermöglicht das IRIS-Strahlrohr bei BESSY II einzigartige *single-shot*-IR-Spektroskopie-Experimente und fügt so die erforderliche Zeitdimension zur Charakterisierung irreversibler Prozesse mittels IR-Spektroskopie hinzu. Die neu bzw. bald verfügbaren IR-Aufbauten (IMBUA, Syrius, Brasilien; CIRI, Solaris, Polen) werden die Anforderungen der *Community* hinsichtlich der Möglichkeiten der IR-Spektroskopie in Kombination mit Mikro- und Nanoskopie und Bildgebung in näherer Zukunft nicht erfüllen können. Dies unterstreicht die Einzigartigkeit des hier abgeschlossenen Vorhabens.

## 9 Erfolgte und geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

### 9.1 Referierte Publikationen (z. B. in Fachzeitschriften oder -büchern und referierte Konferenzproceedings)

Veber, A.; Spedaleri, C.; Kneipp J.: Infrared nanoimaging and spectroscopy of fibroblast cells, **2024**, to be submitted

Ahmadi, H.; van Heugten, P.M.H.; Veber, A.; Puskar, L.; Anderson, P.; Cardinaels, R.: Toughening immiscible polymer blends: the role of interface-crystallization-induced compatibilization explored through nanoscale visualization, **2024**, to be submitted

Intze, A; Rupert, J., Polito, R; Temperini, M.E.; Zacco, E.; Veber, A.; Puskar, L.; Schade, U.; Ortolani, M.; Tartaglia, G.G.; Giliberti, V.; Investigating the effect of RNA on  $\alpha$ -synuclein aggregation by infrared microscopy, **2024**, to be submitted

Duarte, M; Mansilha, C; Melo, A; Sobral, D; Ferreira, R; Gomes, J.P; Rebelo, H; Veber, A; Puskar, L; Schade, U; Jordao, L: Characterization of microbiome, polycyclic aromatic hydrocarbons and microplastics occurrence in the soil of touristic spots located at the margins of Alqueva, *Environmental Pollution*, **2024**, submitted

Veber, A.; Puskar, L.; Kneipp, J.; Schade, U.; Infrared spectroscopy across scales in length and time at BESSY II. *Journal of Synchrotron Radiation*, **2024**, 31, 613-621

Veber, A.; Zancajo, V.M.R.; Puskar, L.; Schade, U.; Kneipp, J.: In situ infrared imaging of the local orientation of cellulose fibrils in plant secondary cell walls, *Analyst*, **2023**, 148, 4138-4147.

Zancajo, V.M.R.; Diehn, S.; Elbaum, R.; Kneipp, J., Multimodal Imaging of Silicified Sorghum Leaves. *Analysis & Sensing*, **2022**, 2, e202200006

### 9.2 Andere Veröffentlichungen (z. B. Konferenzbeiträge wie Vorträge und Poster, unreferierte Proceedings, Conference Notes)

Puskar, L.; Veber, A.; Kneipp, J.; Schade, U.; "Latest developments at IRIS beamline of BESSY II", 12<sup>th</sup> International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources (WIRMS), Barcelona, Spain, 7-11.10.**2024** (talk)

Veber, A.; Puskar, L.; Schade, U.; Kneipp, J.; "Investigation of biological systems at nanoscale using s-SNOM technique", 12th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources (WIRMS), Barcelona, Spain, 7-11.10.**2024** (talk)

Schade U., Veber A., Puskar L., Kneipp J.; "New Status Of The Brilliant Infrared Beamline At The Electron Storage Ring BESSY II", 49th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves (IRMMW-THz), Perth, Australia, 1 – 6.9.**2024** (talk)

Puskar, L, Schade, U; Veber, A.; "IR Beamline for Cultural Heritage and Archeometry applications", BESSY III Workshop: Cultural Heritage and Archaeometry, HZB, Berlin, 24.04.**2024** (talk)

Veber, A, Puskar, L.; Kneipp, J.; Schade, U.; "Nanoscale infrared spectroscopy at the IRIS Beamline", 15th BESSY User Meeting, Berlin 22. -23.06.2023 (poster)

Veber, A, Puskar, L.; Kneipp, J.; Schade, U.; "Nano-FTIR spectroscopy end-station at the IRIS beamline at BESSY II", Near-field Optical Nanoscopy Summer School, San Sebastian, 6 – 9.06. **2023** (poster)

Puskar, L.; Jordao, L.; "Deciphering a potential toxic synergy between persistent organic pollutants", Microscopy at the Frontiers of Science Conference, International Iberian Nanotechnology Laboratory, Braga, Portugal 27-29/09/**2023** (poster)

Jordao, L.; Raposo, A.; Mansilha, C.; Veber, A.; Melo, A.; Rodrigues, J.; Matias, R.; Rebelo, H.; Grossinho H., Cano, M.; Almeida, C; Nogueira, I; Puskar, L; Schade, U; "Occurrence of persistent organic pollutants at Alqueva's surface water at touristic spots", Adapting to Climate Change, IAGLR's 66th Annual Conference on Great Lakes Research, Toronto, Canada May 8–12, **2023** (poster)

Kutzke, H.; Sandu, I.; Puskar, L.; "Synchrotron-based studies in the far-infrared region of pigments from artists' legacies", SR2A 2023 – 10th International Conference on Synchrotron Radiation and Neutrons in Art and Archaeology, Pinakothek der Moderne, Munich, Nov 21 – 24, **2023** (talk)

Puskar, L.; Veber, A.; "When micro meets nano: how to do vibrational characterization of interfaces at the BESSY-II IR beamline", SALSA Make and Measure 2023-Interfaces, Berlin-13-15. 09. **2023** (talk)

Puskar, L.; "Infrared beamline IRIS for the applications on Marine science", Bringing the Sea to Berlin, Berlin, 19-21.06. **2023** (talk)

Veber, A, Puskar, L., Kneipp, J., Schade, U.; "Nano-FTIR spectroscopy end-station at the IRIS beamline at BESSY II", Bringing the Sea to Berlin, Berlin, 19-21.06. **2023** (poster)

Veber, A, Puskar, L., Schade, U., Kneipp, J.; "Multiscale investigation of cellulose using infrared spectroscopy methods", 14th BESSY User Meeting, Berlin 14.12.2022 (poster)

Veber, A, Puskar, V.M. Zancajo, L. Kneipp, J.; Schade, U.; Current state and future of the IRIS THz/Infrared beamline at BESSY II, International Conference on Advanced Vibrational Spectroscopy (ICAVS 2021), Krakow, Poland, 22-27.08.**2021** (talk)

Puskar, L.; Kneipp, J.; Schade, U.; "Synchrotron Microscopy station upgrade for IRIS beamline", 10th International Workshop on Infrared Microscopy and Spectroscopy with Accelerator Based Sources, Campinas and Ubatuba, Brazil, 23-27.09.**2019**

Puskar, L.; Ritter, E.; Schade, U.; "Latest from the IRIS Beamline at BESSY II: Developments and Applications, 7th International Conference on Perspectives in Vibrational Spectroscopy, 25-29.11.**2018** (talk)

### 9.3 Abschlussarbeiten (Bachelor, Master, Diplom, Staatsexamen, Promotion, Habilitation)

Promotion: Dr. Tom Lindtner, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin, 2022. „Characterization of the hygroscopic movement in wild oats seed dispersal“

Promotion: Dr. Victor Manuel Rodriguez Zancajo, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin, 2021 „Vibrational Spectroscopy as a Tool to Understand Plant Silicification“

## Kurzbericht

- öffentlich -

Zuwendungsempfänger:	Humboldt-Universität zu Berlin
Projektleitung:	Prof. Dr. Janina Kneipp
Verbund:	Humboldt-Universität zu Berlin, Kooperationspartner: Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie
Thema:	Größenskalen in der molekularen Bildgebung verbinden: Eine Synchrotron-Mikroskopiestation für räumliche, zeitliche und polarisationsaufgelöste Schwingungsspektroskopie

### 1. Ziel und Inhalt des Projektes

Das technische Ziel von SyMS war die Realisierung eines empfindlichen Schwingungsmikroskopie-Aufbaus unter Nutzung der brillanten Synchrotronstrahlung am IRIS Strahlrohr des Synchrotrons HZB-BESSY II, der über einen breiten Bereich lateraler Auflösungen arbeitet und den Zugriff auf sehr unterschiedliche Skalen der Probenheterogenität ermöglicht, von einzelnen (Makro-)Molekülen bis hin zu mikroskopischen Objekten.

### 2. Ablauf und Ergebnisse des Vorhabens

SyMS wurde in einer Kooperation der HU mit Wissenschaftlerinnen am HZB-BESSY II, die seit 2001 das Strahlrohr IRIS betreiben, umgesetzt. Dies ermöglichte, eine mechanische, optische, Software- und Vakuum-Schnittstelle aller Mikroskopie-Setups am Infrarot-Strahlrohr zu optimieren und umzusetzen. Die mechanische Auslegung der für die Mikroskopiestation notwendigen Strahlrohrmodifikationen wurden mit den Engineering-Tools des HZB entworfen. Der skalenübergreifende Charakter der Mikroskopiestation entsteht durch die Kombination von beugungsbegrenzter Mittelinfrarotmikroskopie (mit einer Auflösung von ~5-10  $\mu\text{m}$ ) mit Raman-Streuung im sichtbaren Bereich (mit einer Auflösung von 300-500 nm).

### 3. Darstellung der wesentlichen Ergebnisse und deren konkreter Nutzen sowie ggf. die Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Der aktuelle Aufbau des IR-Strahlrohrs bei BESSY II umfasst vier verschiedene Endstationen, die eine verbesserte Charakterisierung von Molekülen und Materialien auf unterschiedlichen Längenskalen und Zeitaufösungen ermöglichen. Vergleichbare experimentelle Kapazitäten sind weltweit nur an einer sehr begrenzten Anzahl von IR-Strahlrohren verfügbar. Durch die Kombination des verfügbaren Spektralbereichs (von THz bis mittlerem Infrarot) und der Endstationen für Makro-, Mikro- und Nanospektroskopie steht das Strahlrohr bei BESSY II mit dem jetzt erfolgreich abgeschlossenen Projekt SyMS auf einer Stufe mit den derzeit führenden IR-Strahlrohren weltweit. Zudem ermöglicht das IRIS-Strahlrohr bei BESSY II einzigartige *single-shot*-IR-Spektroskopie-Experimente und fügt so die erforderliche Zeitdimension zur Charakterisierung irreversibler Prozesse mittels IR-Spektroskopie hinzu. Das Projekt wurde in einer Kooperation der Humboldt-Universität zu Berlin mit dem Helmholtz Zentrum Berlin für Materialien und Energie umgesetzt. Die im Projekt erzeugte Mikroskopiestation bildet die Grundlage für eine Vielzahl an internationalen Forschungsk Kooperationen und steht einer großen internationalen Nutzergemeinschaft zur Verfügung. Die bisher laufenden Projekte sind in den unterschiedlichen Gebieten der Materialforschung, der Katalyse und Energieerzeugung, aber auch in der Anwendung zur Untersuchung von Kulturgütern und Kunstschätzen, sowie in den Lebenswissenschaften und in einem Projekt aus den Agrarwissenschaften angesiedelt.