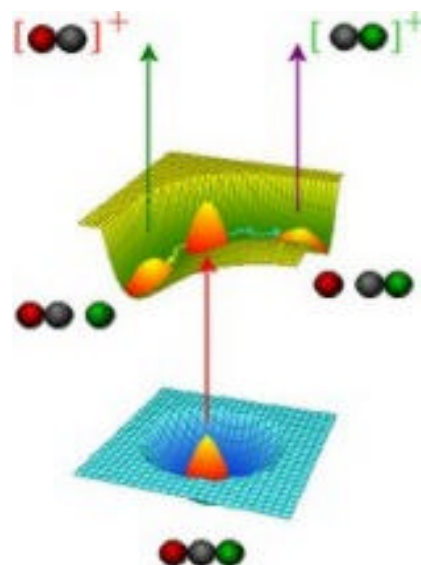


FREIE UNIVERSITÄT BERLIN

Sfb 450

Analyse und Steuerung

ultraschneller photoinduzierter Reaktionen



Forschungsprofile der antragstellenden Teilprojektleiter

zum

Antrag 2001 (2. Halbjahr) - 2004 (1. Halbjahr)

Forschungsprofile der Projektleiter

Bennemann	4
Bernhardt.....	6
Bonacic-Koutecky.....	8
Dietrich.....	11
Diller.....	12
Ekardt	14
Elsässer	16
Ernsting.....	19
Ertl.....	21
Frischkorn.....	23
Garcia	25
Gerber.....	28
Hamm	32
Hertel.....	34
Hotzel	37
Korn.....	39
Manz.....	43
May.....	46
Nibbering.....	48
Radloff.....	50
Schmidt.....	52
Schütte	56
Schulz	58
Schwentner	60
Stehlik.....	63
Vajda	66
Willig.....	69
Wöste.....	71
Wolf.....	74
Zimmermann.....	77

Prof. Dr. K. H. Bennemann

FU Berlin

Kurzbiographie

Geboren 1932 Münster, Studium der Physik Universität Münster, University of Illinois, Urbana (USA), 1962 Promotion University of Illinois/Universität Münster, Postdoc University of Chicago, 1967 Professur University of Rochester (USA), 1971 Professur Freie Universität Berlin.

Auszeichnungen

1966 Cambridge Royal Society, 1969 Sloan Fellowship, 1980 Wissenschaftliche Gesellschaft Berlin, 1995 Japanese Science Award, 1999 US Scientific Medal. Visiting Professorships Tokyo, Haifa, Grenoble, Paris, Cambridge etc. Organizer of International Conferences, Plenary Colloquia.

Forschungsschwerpunkte

Festkörpertheorie, insbesondere seit 1980 Nichtlineare Optik, Kurzzeitphysik, Supraleitung.

Kooperationen

Zahlreiche Zusammenarbeit mit Forschungsinstituten u. a. in den USA, in Japan, Israel, Frankreich, Italien, Holland und England.

Ausgewählte Publikationen (K. H. Bennemann)

Theory for the time-dependence of the response of covalent solids to laser irradiation,

K. H. Bennemann and P. Stampfli,
Appl. Surf. Sci. **109-110**, 11 (1997).

Theory for the spin-dependent photoacoustic response to circularly polarized X-rays: How to detect Magnetism by Using a Microphone,

M. E. Garcia, Ch. Brouder and K. H. Bennemann,
Solid State Commun. **103**, 331 (1997).

Nonequilibrium magnetization dynamics of nickel,

J. Hohlfeld, E. Matthias, R. Knorren and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. Lett. **78**, 4861 (1997).

Angular dependences of third harmonic generation from microdroplets,

J. Kasparian, B. Krämer, J. P. Dewitz, S. Wajda, P. Rairoux, B. Vezin, V. Boutou, W. Hübner, J. P. Wolf, L. Wöste and K. H. Bennemann

Phys. Rev. Lett. **78**, 2952 (1997).

Theory for the nonlinear optical response at noble-metal surfaces with nonequilibrium electrons,

T. A. Luce, W. Hübner and K. H. Bennemann,

Zeitschrift für Physik B **102(2)**, 223 (1997).

Theory for spinpolarized oscillations of the second-harmonic yield due to quantum well states,

T. A. Luce, W. Hübner and K. H. Bennemann,

Verh. Deutsch. Phys. Ges. **7**, 628 (1997).

Theory for the giant magneto-optical kerr rotations in CeSb,

U. Pustogowa, T. A. Luce, W. Hübner and K. H. Bennemann,

Verh. Deutsch. Phys. Ges. **7**, 818 (1997).

Nonlinear magneto-optical Kerr spectra of thin ferromagnetic iron films calculated with *ab initio* bandstructure theory,

U. Pustogowa, W. Hübner, K. H. Bennemann and T. Kraft,

Zeitschrift für Physik B **102(1)**, 109 (1997).

Theory for the temperature driven first and second order reorientation of the thin film magnetization,

P.-J. Jensen and K. H. Bennemann,

Solid State Comm. **105**, 577 (1998).

Theory for nonlinear optics at interfaces and in thin films of metals: selected problems

T. A. Luce and K. H. Bennemann,

in: Nonlinear Optics in Metals. Oxford: Clarendon Press 1998, p. 437.

Calculation of the short-time dynamics of the hot-electron distribution in noble and transition metals,

R. Knorren and K. H. Bennemann,

Appl. Phys. B **68**, 401 (1999).

Dynamics of excited electrons in Copper and ferromagnetic transition metals: Theory and experiment,

R. Knorren, K. H. Bennemann, R. Burgemeister and M. Aeschlimann,

Phys. Rev. B **61**, 9427 (2000).

Dynamics of excited electrons in Copper: Role of Auger electrons,

R. Knorren, G. Bouzerar and K. H. Bennemann,

Cond-mat 002293, submitted to Phys. Rev. B.

Theory for two-photon-photoemission: Transport and temperature effects,

R. Knorren, G. Bouzerar and K. H. Bennemann,

Cond-mat 0003305, submitted to Phys. Rev. Lett.

Theory for spin fluctuation-induced high- T_c superconductivity,

D. Manske and K. H. Bennemann,

Mol. Phys. Rep. **24**, im Druck.

Dr. Thorsten Marco Bernhardt

Freie Universität Berlin

Kurzbiographie

Geboren am 25. Juli 1967 in Marburg an der Lahn.

Studium der Chemie

an der Philipps-Universität Marburg von 10/1987 bis 09/1992

Auslandsstudium als Erasmus-Stipendiat

in Lille, Frankreich

von 09/1990 bis 03/1991

Diplom in Physikalischer Chemie bei Prof. Dr. F. Hensel

zum Thema: „*Lichtinduzierte Prozesse an metastabilen*

Schwefelschichten“

am 25. September 1992

Promotion

an der Humboldt-Universität zu Berlin

im Fach Physikalische und Theoretische Chemie

bei Prof. Dr. K. Rademann zum Thema:

„*Untersuchungen zur Wechselwirkung gröÙenselektierter*

Antimon- und Bismutclusterionen mit einer

Graphit(0001)-Oberfläche bei Energien bis zu 600 eV.“

am 26. November 1997

Wissenschaftlicher Mitarbeiter

an der Philipps-Universität Marburg

von 10/1992 bis 10/1993

Wissenschaftlicher Mitarbeiter an

der Humboldt-Universität zu Berlin

von 11/1993 bis 12/1997

Postdoctoral Scholar

am California Institute of Technology, USA,

bei Prof. Dr. A. H. Zewail als Feodor Lynen-Stipendiat

der Alexander von Humboldt-Stiftung.

Arbeiten zum Thema: „*Femtosekunden-Dynamik von*

Reaktionen in Molekülen und molekularen Clustern

in der Gasphase.“

von 01/1998 bis 12/1999

Wissenschaftlicher Mitarbeiter

am Institut für Experimentalphysik der Freien Universität Berlin.

Arbeiten zum Thema: „*Dynamik und Kinetik der*

Reaktionen kleiner Metallcluster in der Gasphase

und auf Oberflächen.“

seit 01/2000

Forschungsaufenthalt

am California Institute of Technology als Stipendiat der

Alexander von Humboldt-Stiftung

von 07/2000 bis 08/2000

Ausgewählte Publikationen

- T. M. Bernhardt, B. Kaiser, K. Rademann (1997):
Fragmentation of clusters induced by collision with a solid surface: comparison of antimony and bismuth cluster ions,
Z. Phys. D **40**, 327 (1997).
- B. Kaiser, T. M. Bernhardt, K. Rademann (1997):
Scattering and deposition of mass-selected antimony clusters,
Nucl. Instrum. and Meth. in Phys. Res. B **125**, 223 (1997).
- M. Kinne, T. M. Bernhardt, B. Kaiser, K. Rademann (1997):
Formation and stability of antimony and bismuth oxide clusters: A mass spectrometric investigation,
Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc. **167/168**, 161 (1997).
- B. Kaiser, T. M. Bernhardt, K. Rademann (1998):
Deposition of size-selected clusters at hyperthermal energies investigated by STM,
Appl. Phys. A **66**, S711 (1998).
- T. M. Bernhardt, B. Kaiser, K. Rademann (1998):
Formation of superperiodic patterns on highly oriented pyrolytic graphite by manipulation of nanosized graphite sheets with the STM tip,
Surf. Sci. **408**, 86 (1998).
- D. Zhong, E. W.-G. Diau, T. M. Bernhardt, S. De Feyter, J. D. Roberts, A. H. Zewail (1998):
Femtosecond dynamics of valence-bond isomers of azines: Transition states and conical intersections,
Chem. Phys. Lett. **298**, 129 (1998).
- B. Kaiser, T. M. Bernhardt, M. Kinne, K. Rademann, A. Heidenreich (1999):
Formation, stability, and structures of antimony oxide clusters ions,
J. Chem. Phys. **110**, 1437 (1999).
- B. Kaiser, T. M. Bernhardt, B. Stegemann, J. Opitz, K. Rademann (1999):
Bimodal distribution in the fragmentation behavior of small antimony clusters Sb_x^+ ($x = 3-12$) scattered from a highly oriented pyrolytic graphite surface,
Phys. Rev. Lett. **83**, 2918 (1999).
- D. Zhong, T. M. Bernhardt, A. H. Zewail (1999):
Femtosecond real-time probing of reactions. 24. Time, velocity and orientation mapping of the dynamics of dative bonding in bimolecular electron transfer reactions,
J. Phys. Chem. A **103**, 10093 (1999).
- L.-D. Socaciu, J. Hagen, U. Heiz, T. M. Bernhardt, T. Leisner, L. Wöste (2000):
Reaction mechanism for the oxidation of free silver dimers,
Chem. Phys. Lett. (2000), submitted.T

Prof. Dr. Vlasta Bonačević Koutecký

HU Berlin

Arbeitsgebiet: Struktur, Optischer Response, Dynamik von Molekülen und Clustern, Photochemie

Kurzbiographie:

Geboren 1943. Nach dem Diplom im Fachgebiet Theoretische Physik (1967; Universität Zagreb, Kroatien) und der Promotion im Fachgebiet Quantenchemie (1971; bei Prof. R.G. Parr, Johns Hopkins University, USA) sowie einem Postdoctoral Fellow-Aufenthalt (1971-1973: an der Belfer Graduate School of Science, Jeshiva University, New York) erfolgte die Habilitation im Fachbereich Chemie an der FU Berlin (1977). Nach der Forschungs- und Lehrtätigkeit an der Gesamthochschule Wuppertal (1979-1980) Ernennung zum apl. Professor an der FU Berlin (1982). Zahlreiche Gastprofessuren an europäischen und amerikanischen Universitäten. Seit 1994 Professorin für Physikalische und Theoretische Chemie am Walther-Nernst-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Humboldt-Universität Berlin.

Auszeichnungen und Sonderfunktionen:

Fulbright Stipendium 1968, Miller Research Professorship at the Miller Institute for Basic Research in Science, University of California at Berkeley, 1999;

Gutachtertätigkeiten bei nationalen und internationalen Grantagencies; Organisation von internationalen Cluster Symposien und Workshops, 1997, 1998, 1999; Dekanin der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I der HU 1996-1998

Kooperationen:

University of Tel Aviv (Prof. J. Jortner), Università di Milano (Prof. P. Fantucci), Université Lyon (Prof. Broyer), University of Berkeley (Prof. B. Whaley), Universität Würzburg (Prof. G. Gerber), Universität Karlsruhe (Prof. M. Kappes), Universität Freiburg (Prof. H. Haberland), u.a.

Forschungsschwerpunkte:

- Entwicklung von Methoden zu stationären optischen Eigenschaften und zur Ultrakurzzeit-Spektroskopie finiter Systeme.
- Kombinierte Methoden der ab initio Quantenchemie, der Molekulardynamik in Grund- sowie in angeregten elektronischen Zuständen und der theoretischen Physik (Wigner – Verteilung) zur Untersuchung ultrakurzer zeitabhängiger Prozesse in Molekülen und Clustern.
- Strukturelle, optische, temperaturabhängige und dynamische Eigenschaften, sowie Reaktivität von metallischen, Halbleiter-, Metalloxid- und Alkalihalogenid-Clustern.
- Photochemie, Photophysik und chemische Reaktivität atomarer Cluster in der Gasphase.
- Brücke zwischen Clusterphysik und chemischer Reaktivität.

Ausgewählte Publikationen (1995 – 2000):

- [1] V. BonaèiæKoutecký, L. Cespiva, P. Fantucci, C. Fuchs, J. Koutecký, J. Pittner: „Quantum Chemical Interpretation of Optical Response of Small Metal Clusters“, in the Comments on Atomic and Molecular Physics, **Vol. 31, n° 3-6**, 233 (1995).
- [2] V. BonaèiæKoutecký, J. Pittner, C. Fuchs, P. Fantucci, M.F. Guest, J. Koutecký: „Ab Initio Predictions of Structural and Optical Response Properties of Na_n^+ Clusters: Interpretation of Depletion Spectra at Low Temperature“, J. Chem. Phys. **104**, (4), 1427 (1996).
- [3] V. BonaèiæKoutecký, J. Pittner, J. Koutecký: “Ab-initio study of structural and optical response properties of excess-electron lithium-hydrids and sodium-fluoride clusters”, Chem. Phys. **210**, 313 (1996).
- [4] V. BonaèiæKoutecký, J.Jellinek, M. Wichert, P. Fantucci: “Ab initio molecular dynamics study of solid- to liquid-like transitions in Li_9^+ , Li_{10} and Li_{11}^+ clusters”, J. Chem. Phys. **107 (16)**, 6321-6334 (1997).
- [5] D. Reichardt, V. BonaèiæKoutecký, P. Fantucci, J. Jellinek: “Ab initio gradient corrected density functional molecular dynamics; Investigation of structural and dynamical properties of the Li_8 cluster”, Chem. Phys. Lett. **279**, 129-139, (1997).
- [6] M. Warcken, V. BonaèiæKoutecký: “Quantum mechanical treatment of stationary and dynamical properties of bound vibrational systems: Application to the relaxation dynamics of Ag_5 after an electron photodetachment”, Chem. Phys. Lett. **272**, 284 (1997).
- [7] M. Hartmann, J. Pittner, V. BonaèiæKoutecký, A. Heidenreich, J. Jortner: „Theoretical exploration of femtosecond multi state nuclear dynamics of small clusters“, J. Chem. Phys. **108 (8)**, 3096-3113, (1998).
- [8] M. Hartmann, J. Pittner, V. BonaèiæKoutecký, A. Heidenreich, J. Jortner: „Ultrafast Dynamics of Small Clusters on the Time Scale of Nuclear Motion“, J. Phys. Chem. A, **102 (n° 23)**, 4069-4074, (1998).
- [9] V. BonaèiæKoutecký, P. Fantucci, J. Koutecký: „Electronic Structure of Metal Clusters“ in „The Encyclopedia of Computational Chemistry“, Schleyer, P.V.R.; Allinger, N.L.; Clark, T.; Gasteiger, J.; Kollman, P.A.; Schaefer III, H.F.; Schreiner, P.R. (Eds.); John Wiley & Sons: Chichester, 1998, Vol 2, pp. 876-892.
- [10] V. BonaèiæKoutecký, J. Pittner, D. Reichardt, P. Fantucci, J. Koutecký: „The Quantum Chemical Approach“ in „Metal Clusters“ by: John Wiley & Sons, Ltd. (1999).

- [11] V. BonaèiaKoutecký, J. Pittner, M. Boiron, P. Fantucci: “An accurate relativistic effective-core-potential for excited states of Ag-atom; Application to study of the absorption spectra of Ag_n and Ag_n^+ clusters”, *J. Chem. Phys.* **110**, 3876, (1999).
- [12] M. Hartmann, J. Pittner, H. v. Dam, V. BonaèiaKoutecký: “Theoretical study of femtosecond pump-probe signals of nonstoichiometric alkali halide clusters”, *Eur. Phys. J. D* **9**, (1999).
- [13] M. Bienati, V. BonaèiaKoutecký, P. Fantucci: „A theoretical study of the reactivity of Bismuth-Oxide cluster cations with Ethene in the presence of molecular oxygen“, *J. Phys. Chem. A*, **104 (30)**, 6983-6992, (2000).
- [14] M. Hartmann, J. Pittner, V. BonaèiaKoutecký: „Ab initio adiabatic dynamics involving excited states combined with Wigner distribution approach to ultrafast spectroscopy illustrated on alkali halide clusters“ *J. Chem. Phys.*, im Druck.
- [15] M. Hartmann, J. Pittner, V. BonaèiaKoutecký: „Ab initio nonadiabatic dynamics involving conical intersection combined with Wigner distribution approach to ultrafast spectroscopy illustrated on Na_3F_2 cluster“, *J. Chem. Phys.*, im Druck.

Dr. habil. Peter Dietrich

FU Berlin

Kurzbiographie:

Geboren 1959; Physikstudium 1977-1985 in Bonn; Promotion 1989 an der ETH Zürich zum Thema "*Zeitaufgelöste Experimente zur Infrarot-Photochemie*"; 1990-1993 wissenschaftlicher Mitarbeiter am NRC in Ottawa, Kanada bei Dr. P. B. Corkum mit Arbeitsgebiet "*Wechselwirkung kleiner Moleküle mit intensiven ultrakurzen Laserpulsen*"; 1994-1998 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachbereich Physik der FU Berlin mit Arbeitsgebiet "*Dynamik kleiner Moleküle in Edelgasmatrizen*" und Aufbau eines Femtosekundenlaserlabors zur Ultrakurzzeitspektroskopie an Molekülen in der kondensierten Phase im Rahmen des Sfb 337; seit 1998 TP im Sfb 450 mit Prof. Dr. N. Schwentner; seit 1999 wissenschaftlicher Assistent am Fachbereich Physik der FU Berlin; Habilitation 1999 in Experimentalphysik an der FU Berlin zum Thema "*The interaction of small molecular systems with ultrashort laser pulses: From strong fields to high time resolution*".

Gastaufenthalte, Sonderfunktionen:

1999 Visiting Scientist am NRC in Ottawa, Kanada

Gutachter für J. Chem. Phys., Opt. Lett.

Wichtige Veröffentlichungen der letzten fünf Jahre:

1. P. Dietrich, M. Yu. Ivanov, F. A. Ilkov und P. B. Corkum, "*Two-electron dissociative ionization of H_2 and D_2 in infrared laser fields*", Phys. Rev. Lett. **77**, 4150-4153 (1996)
2. P. Dietrich, "*Subharmonic resonances in the strong field dissociation of homonuclear molecular ions*", Phys. Rev. A **57**, 476-483 (1998)
3. P. Dietrich und N. Schwentner, "*Empirical Jahn-Teller potential surfaces for silver doped xenon matrices*", J. Chem. Phys. **111**, 2133-2142 (1999)
4. K. Bammel, P. Dietrich und N. Schwentner, "*Electron-lattice dynamics on Jahn-Teller surfaces in Ag:Xe crystals*", J. Chem. Phys. **111**, 2123-2132 (1999)
5. P. Dietrich, P. B. Corkum und F. Krausz, "*Determining the absolute carrier phase of a few-cycle laser pulse*", Opt. Lett. **25**, 16-18 (2000)
6. M. Bargheer, P. Dietrich, K. Donovang und N. Schwentner, "*Extraction of potentials and dynamics from condensed phase pump-probe spectra: Application to I_2 in Kr matrices*", J. Chem. Phys. **111**, 8556-8564 (1999)
7. D. M. Villeneuve, S. Aseyev, P. Dietrich, M. Yu. Ivanov und P. B. Corkum, "*Forced molecular rotations in an optical centrifuge*", Phys. Rev. Lett. **85**, 542-545 (2000)

Dr. Rolf Diller

FU Berlin

Arbeitsgebiet: Dynamik photoinduzierter Prozesse in Proteinen

Kurzbiographie

Geboren 1958; Physikstudium in Göttingen 1979-1984, Anfertigen der Dissertation am Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie in Göttingen 1985-1988, Promotion an der Universität Göttingen 1988 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Planck Institut für Biophysikalische Chemie in Göttingen 1988-1989, Postdoc bei Prof. Dr. R. M. Hochstrasser, Department of Chemistry, University of Pennsylvania in Philadelphia 1988-1992, Wissenschaftlicher Mitarbeiter bzw. Habilitationsstipendiat der Deutschen Forschungsgemeinschaft am FB Physik der FU Berlin 1992-1998, Aufbau einer Arbeitsgruppe zur Dynamik photoinduzierter Prozesse in Proteinen mittels ultraschneller optischer und Infrarot-Spektroskopie in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. D. Stehlik, Habilitation am FB Physik der FU Berlin 1998, seit 1998 Oberassistent am FB Physik der FU Berlin.

Sonderfunktionen

1996-1998 Projektleiter im DFG-Schwerpunkt "Femtosekunden-Spektroskopie elementarer Anregungen in Atomen, Molekülen und Clustern"; Seit 1998 Teilprojektleiter im DFG-Sonderforschungsbereich 450 "Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen" (Übernahme des Schwerpunkt-Teilprojektes in Sfb 450); Mitarbeit im IRIS-Projekt (Infrared Initiative Synchrotron Radiation) bei BESSY II

Auslandsaufenthalte

1989-1992 Stipendiat der Deutschen Forschungsgemeinschaft, bzw. "post doctoral fellow" bei Prof. Dr. R. M. Hochstrasser, Department of Chemistry, University of Pennsylvania, Philadelphia;

1993-1994 Gastaufenthalt bei Prof. Hochstrasser,

Wissenschaftliche Kooperationen

Weizmann Institut, (Prof. M. Sheves), Freie Universität Berlin (Prof. M. Heyn, Dr. U. Alexiev, Dr. T. Lamparter), Justus Liebig Universität Giessen (Prof. J. Hughes), Friedrich Schiller Universität Jena (PD. Dr. G. Hermann), Technische Universität Berlin (PD. Dr. E. Schlodder)

Forschungsschwerpunkte

Ultraschnelle Dynamik elektronischer und Schwingungsfreiheitsgrade bei Photoreaktionen Chromoproteinen unter Einbeziehung modifizierter Systeme.

- Ultrakurzzeit-Infrarotspektroskopie an Bakteriorhodopsin, auch mit artifiziellem Chromophor: Aufklärung von Prozessen wie photoinduzierte Konformationsänderungen (Trans-cis-Isomerisierung), Verlagerung von elektronischer Energie auf Schwingungsenergie sowie Dynamik und Wege von Relaxationsprozessen inklusive Proteindynamik. Die Zeitauflösung im Bereich von 200 fs wird erreicht durch Summenfrequenzbildung eines Dauerstrich-CO-Lasers mit einem ultrakurzen optischen Puls oder durch parametrische Erzeugung von IR-Pulsen.
- Optische Ultrakurzzeitspektroskopie an Bakteriorhodopsin bzw. Bakteriorhodopsin-Mutanten und cyanobakteriellem Phytochrom mit modifizierten Chromophoren: Aufklärung der Beziehung zwischen der Spezifität der Photoreaktion und der Wechselwirkung des betreffenden Reaktanden mit seiner Proteinumgebung. Einfluß der Proteinumgebung auf die elektronischen Energiehyperflächen. Systemmodifikationen durch Mutationen, Änderung von pH und Ionenkonzentration etc.

Publikationen

R. Diller, S. Maiti, G. C. Walker, B. R. Cowen, R. S. Pippenger, R. Bogomolni and R. M. Hochstrasser, *Femtosecond Time-Resolved Infrared Laser Study of the J-K Transition of Bakteriorhodopsin*, Chem. Phys. Lett. **241**, 109 (1995)

R. Dziewior and R. Diller, *Femtosecond Infrared Spectroscopy on Bakteriorhodopsin using a Broad Band Carbon Monoxide Laser*, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **100**, 2103 (1996)

R. Diller, *Vibrational Relaxation during the Retinal Isomerization in Bakteriorhodopsin*, Chem. Phys. Lett. **295**, 47-55, (1998)

R. Dziewior, K. Romey and R. Diller, *Femtosecond Time Resolved Infrared Spectroscopy of the Ethylenic Stretch Vibration during the all-trans to 13-cis Isomerization of Bakteriorhodopsin*, Laser Chem. **19**, 173 (1999)

K. Heyne, J. Herbst B. Dominguez-Herradon, U. Alexiev and R. Diller, *Reaction Control in Bakteriorhodopsin: Impact of Arg82 and Asp85 on the Fast Retinal Isomerization, studied in the Second Site Revertant Arg82Ala/Gly231Cys and Various Purple and Blue Forms of Bakteriorhodopsin*, J. Phys. Chem. B. **104**, 6053-6058 (2000)

Priv. Doz. Dr. Walter Ekardt

Fritz-Haber-Institut

Arbeitsgebiet: Elektronische Struktur und Dynamik angeregter Zustände in Festkörpern und Systemen reduzierter Dimension

Kurzbiographie:

Geboren 1941, Physikstudium 1961 – 68 an der TU Berlin, Promotion 1975, Habilitation 1977, seit 1.2.1978 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft.

Auszeichnungen:

Stipendiat der Studienstiftung des Deutschen Volkes

- Scheelpreis (1977)
- Habilstipendium der Deutschen Forschungsgemeinschaft
- Gastprofessor an der University of Tennessee, Knoxville, USA auf Einladung von G. D. Mahan (Feb. 1985 – Juli 1985)
- Gastprofessor bei NORDITA, Kopenhagen auf Einladung von B. Mottelson (Juli 1991 – Dez. 1991)

Forschungsschwerpunkte:

- Dynamische Effekte in Vielelektronensystemen; sowohl in Modellsystemen (Jellium) als auch in realen Systemen (*ab initio*) wie z.B. Metallclustern und Metallen, im Volumen sowie an reinen und absobatbedeckten Oberflächen.
- Beispielhafte Fragestellungen:
Wie lange dauert es, eine externe Störung abzuschirmen (Photonenfeld oder ein Loch im besetzten Teil der Bandstruktur)? Wie lange dauert es, eine chemische Bindung an der Oberfläche zu lösen?
- Eingesetzte Methoden:
Bestimmung der elektronischen Struktur im Grundzustand im Rahmen der Dichtefunktionaltheorie unter Benutzung von Pseudopotentialen oder sog. “all-electron”-Methoden, Untersuchung der Elektronendynamik im angeregten Zustand im Rahmen von Vielteilchenstörungstheorie (Stichworte: Dyson-Gleichung, GW-Näherung).

Kooperationen:

1. Experiment

Karl-Heinz Meiwes-Broer, Rostock

Hellmut Haberland, Freiburg

Ludger Wöste, FU Berlin

Martin Wolf, FU Berlin/Fritz-Haber-Institut

2. Theorie

Angel Rubio, Valladolid, Spanien

Pedro Echenique, San Sebastian, Spanien

Lucia Reining, Orsay, Frankreich

Adolfo Eguiluz, UT Knoxville, USA

Jorge Pacheco, Coimbra, Portugal

Ausgewählte Publikationen der letzten fünf Jahre:

W. Ekardt, W.-D. Schöne, and J. M. Pacheco

“Application of the Jellium Model and its Refinements to the Study of the Electronic Properties of Metal Clusters”: in W. Ekardt (Ed.) METAL CLUSTERS, Wiley Series in Theoretical Chemistry, Wiley (1999), p. 1-27.

W.-D. Schöne, R. Keyling, M. Bandiaç and W. Ekardt

“Calculated lifetimes of hot electrons in aluminum and copper using a plane-wave basis set”, Phys. Rev. B **60** 8616 (1999).

R. Keyling, W.-D. Schöne, and W. Ekardt

“Comparison of the lifetime of excited electrons in noble metals”, Phys. Rev. B **61**, 1670 (2000).

W. Ekardt, W.-D. Schöne, and R. Keyling

“The determination of the lifetime of hot electrons in metals by time-resolved two-photon photoemission: The role of transport effects, virtual states, and transient excitons”, Appl. Phys. A (im Druck).

W.-D. Schöne and W. Ekardt

“Time-dependent screening of a positive charge distribution in metals: Excitons on an ultrashort time scale”, Phys. Rev. B (im Druck).

Prof. Dr. rer. nat. Thomas Elsässer

Max-Born-Institut

Kurzbiographie:

Geboren 1957 in Tübingen, 1976-1982 Studium der Physik an der Universität Heidelberg und der Technischen Universität München, 1982 Diplom in Physik, 1986 Promotion an der TU München bei Prof. Wolfgang Kaiser, 1986-1990 Akademischer Rat am Physik Department der TU München, 1990 Forschungsaufenthalt bei den AT&T Bell Laboratories, Holmdel, NJ, USA, 1991 Habilitation an der Technischen Universität München, 1991-1993 Akademischer Oberrat am Physik Department der TU München, seit 1993 Direktor am Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Berlin, seit 1994 C4-S-Professur für Experimentalphysik an der Humboldt-Universität zu Berlin. Rufe auf ein Ordinariat für Experimentalphysik an der Universität Zürich (1993) und auf eine C4-Professur für Experimentalphysik an der Universität Stuttgart (1997) wurden abgelehnt.

Auszeichnungen und Sonderfunktionen:

1986 Dissertationspreis des Bundes der Freunde der TU München, 1991 Rudolf-Kaiser-Preis, 1995 Otto-Klung-Preis für Physik. Mitglied des Apparatenausschusses der Deutschen Forschungsgemeinschaft, Mitherausgeber der Zeitschriften Applied Physics A, Journal of the Optical Society of America B, Chemical Physics Letters, European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry, Program Chair der Konferenz Ultrafast Phenomena XI (1998), General Chair der Konferenz Ultrafast Phenomena XII (2000).

Forschungsschwerpunkte:

Erzeugung ultrakurzer Lichtimpulse und Ultrakurzzeitspektroskopie kondensierter Materie: Nichtgleichgewichtsdynamik elementarer Anregungen in Halbleitern, Halbleiter-Nanostrukturen und Supraleitern, Ultrakurzzeitdynamik von Wasserstoffbrücken in Flüssigkeiten und Lösungen, chemische Elementarreaktionen in der kondensierten Phase. Optische Nahfeldmikroskopie an Festkörpern.

Kooperationen:

Zahlreiche Kooperationen mit Universitäten und Forschungsinstituten im In- und Ausland.

Ausgewählte Veröffentlichungen (1996-2000)

1. C. Chudoba, E. Riedle, M. Pfeiffer, T. Elsaesser: *Vibrational coherence in ultrafast excited state proton transfer*
Chem. Phys. Lett. 262, 622 (1996)
2. M. Pfeiffer, K. Lenz, A. Lau, T. Elsaesser, T. Steinke: *Analysis of the vibrational spectra of heterocyclic aromatic molecules showing internal proton and deuterium transfer*
J. Raman Spectrosc. 28, 61 (1997)
3. Richter, M. Sueptitz, C. Lienau, T. Elsaesser, M. Ramsteiner, R. Nötzel, K.H. Ploog: *Real-space transfer and trapping of carriers into single GaAs quantum wires studied by near-field optical spectroscopy*
Phys. Rev. Lett. 79, 2145 (1997)
4. M. Joschko, M. Woerner, T. Elsaesser, E. Binder, T. Kuhn, R. Hey, H. Kostial, K. Ploog: *Heavy-light hole quantum beats in the band-to-band continuum of GaAs observed in 20 femtosecond pump-probe experiments*
Phys. Rev. Lett. 78, 737 (1997)
5. R. A. Kaindl, S. Lutgen, M. Woerner, T. Elsaesser, B. Nottelmann, V. M. Axt, T. Kuhn, A. Hase, H. Künzel: *Ultrafast dephasing of coherent intersubband polarizations in a quasi-two-dimensional electron plasma*
Phys. Rev. Lett. 80, 3575 (1998)
6. C. Chudoba, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser: *Site-specific excited-state solute-solvent interactions probed by femtosecond vibrational spectroscopy*
Phys. Rev. Lett. 81, 3010 (1998)
7. R. A. Kaindl, D. C. Smith, M. Joschko, M. P. Hasselbeck, M. Woerner, T. Elsaesser: *Femtosecond infrared pulses tunable from 9 to 18 μm at 88 MHz repetition rate*
Opt. Lett. 23, 861 (1998)
8. C. Chudoba, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser: *Ultrafast structural response of hydrogen bonded complexes to electronic excitation in the liquid phase*
J. Phys. Chem. A 103, 5625 (1999)
9. E. T. J. Nibbering, C. Chudoba, T. Elsaesser: *Hydrogen-bond dynamics and solvation of electronically excited states determined by femtosecond vibrational spectroscopy*
Israel J. of Chem. 39, 333 (1999)
10. C. Chudoba, A. Kummrow, J. Dreyer, J. Stenger, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser, K. Zachariasse: *Excited state structure of 4-dimethylamino-benzonitrile studied by femtosecond mid-infrared spectroscopy and ab-initio calculations*
Chem. Phys. Lett. 309, 357 (1999)

11. S. Hogiu, W. Werncke, M. Pfeiffer, T. Elsaesser: *Mode specific vibrational kinetics after intramolecular electron transfer studied by picosecond anti-Stokes Raman spectroscopy*
Chem. Phys. Lett. 312, 407 (1999)
12. S. Hogiu, W. Werncke, M. Pfeiffer, J. Dreyer, T. Elsaesser: *Mode specific vibrational excitation and energy redistribution after ultrafast intramolecular electron transfer*
J. Chem. Phys. 113, 1587 (2000)
13. E. T. J. Nibbering, F. Tschirschwitz, C. Chudoba, T. Elsaesser: *Femtochemistry of hydrogen-bonded complexes after electronic excitation in the liquid phase: the case of coumarin 102*
J. Phys. Chem. A 104, 4236 (2000)
14. F. Eickemeyer, R. A. Kaindl, M. Woerner, T. Elsaesser, A. M. Weiner: *Controlled shaping of ultrafast electric field-transients in the mid-infrared spectral range*
Opt. Lett. 25, 1472 (2000)
15. R. A. Kaindl, M. Woerner, T. Elsaesser, D. C. Smith, J. F. Ryan, G. A. Farnan, M. P. McCurry, D. G. Walmsley: *Ultrafast mid-infrared response of YBa₂Cu₃O₇*
Science 287 (2000), 470-473

Prof. Nikolaus P. Ernsting, Ph.D.

HU Berlin

Arbeitsgebiet: Femtosekunden-Spektroskopie in kondensierter Phase

Kurzbiographie

Geboren 1950. Chemiestudium 1969-72 in Münster, 1972-73 in Dundee (Schottland). 1973 Studium der Theoretischen Chemie in Bonn, dort 1976 Diplom in Chemie bei S. Peyerimhoff. 1977-79 Promotion bei J. Pfab in Edinburgh (Heriot-Watt University) zum Thema *Spektroskopische Untersuchungen von Nitrosomethan und perhalogenierten Nitrosomethanen*. 1979-81 Postdoc bei J.C.D. Brand (University of Western Ontario, Canada) mit Arbeiten zur *hochauflösenden Laser-Polarisationsspektroskopie von NO₂*. 1981 wissenschaftlicher Mitarbeiter von F. P. Schäfer (Abteilung Laserphysik) am Max-Planck-Institut für biophysikalische Chemie in Göttingen, seit 1984 mit fester Anstellung. Dort zunächst Arbeiten zur *Spektroskopie von Farbstoffen im Düsenstrahl*, seit 1987 *Ultrakurzzeit-Spektroskopie*. 1992 Habilitation an der Georg-August-Universität Göttingen mit dem Thema *Der primäre Reaktionsschritt in ausgesuchten photochromen Systemen*. Seit 1993 Professur (C4) für Physikalische und Theoretische Chemie an der Humboldt-Universität zu Berlin, 1995-97 Direktor des Chemischen Institutes. 1998 Leibniz-Preis der Deutschen Forschungsgemeinschaft.

Kooperationen

Hebrew University Jerusalem (Prof. S. Ruhmann), Russische Akademie der Wissenschaften, Troitsk (Prof. Y. Lozovik), Universität Regensburg (Prof. B. Dick).

Forschungsschwerpunkte

- Zeitaufgelöster optischer Kerr-Effekt von Flüssigkeiten,
- Optische Spektroskopie von isolierten organischen Chromophoren,
- Schnelle Photoreaktionen von organischen Chromophoren in kondensierter Phase (Protonentransfer, Isomerisierungen, Ladungstransfer).
- Solvatationsdynamik von Farbstoffen.

Wichtige Veröffentlichungen der letzten 5 Jahre

S.A. Kovalenko, R. Schanz, V.M. Farztdinov, H. Hennig, N.P. Ernsting: *Femtosecond relaxation of photoexcited para-nitroaniline: solvation, charge transfer, internal conversion and cooling*, Chem. Phys. Letters **323**, 312 (2000).

T. Laurent, H. Hennig, N. P. Ernsting, S. A. Kovalenko: *The ultrafast optical Kerr effect in liquid fluoroform: an estimate of the collision-induced contribution*, Phys. Chem. Chem. Phys. **2**, 2691 (2000).

A. Mühlfordt, R. Schanz, N.P. Ernsting, V. Farztdinov, S. Grimme: *Coumarin 153 in the gas phase: optical spectra and quantum-chemical calculations*, Phys. Chem. Chem. Phys. **1**, 3209 (1999).

S.A. Kovalenko, A.L. Dobryakov, J. Ruthmann and N.P. Ernsting: *Femtosecond spectroscopy of condensed phases with supercontinuum probing*, Phys. Rev. A **59**, 2369 (1999).

J. Ruthmann, S.A. Kovalenko, D. Ouw, N.P. Ernsting: *Femtosecond relaxation of 2'-amino-7-nitrofluorene in acetonitrile: observation of the oscillatory contribution to the solvent response*, J. Chem. Phys. **109**, 5466 (1998).

S.A. Kovalenko, J. Ruthmann, N.P. Ernsting: *Femtosecond hole-burning spectroscopy with stimulated emission pumping and supercontinuum probing*, J. Chem. Phys. **109**, 1894 (1998)

S.A. Kovalenko, J. Ruthmann, N.P. Ernsting: *Ultrafast Stokes shift and excited-state transient absorption of coumarin 153 in solution*, Chem. Phys. Letters **271**, 40 (1997).

Yu. E. Lozovik, A.L. Dobryakov, N.P. Ernsting, S.A. Kovalenko: *A new method of non-Fermi liquid study by pump-supercontinuum probe femtosecond spectroscopy*, Physics Letters A **223**, 303 (1996).

A. Mühlfordt, U. Even, N.P. Ernsting: *Zero-kinetic-energy photoelectron spectroscopy and excited-state intramolecular proton transfer in a 'double' benzoxazole*, Chem. Phys. Letters **263**, 178 (1996).

T. Bultmann, N.P. Ernsting: *Competition between geminate recombination and solvation of polar radicals following ultrafast photodissociation of bis(p-aminophenyl)disulfide*, J. Phys. Chem. **100**, 19417 (1996).

Prof. Dr. Gerhard Ertl

Fritz-Haber-Institut

**Arbeitsgebiet: Oberflächenphysik, Heterogene Katalyse, Elektrochemie,
Nichtlineare Dynamik**

Kurzbiographie:

Geboren 1936, Physikstudium 1955 – 61 an der TH Stuttgart, Univ. Paris und Univ. München, Doktorarbeit bei Prof. H. Gerischer an der TU München, Promotion 1965, Habilitation 1967, wiss. Assistent TU München 1965 – 68, Professor für Physikalische Chemie TU Hannover 1968 – 73, Univ. München 1973 – 86, Direktor der Abteilung Physikalische Chemie am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft seit 1986.

Auszeichnungen:

P. H. Emitt Award, E. W. Müller Award, Leibniz-Preis, Hewlett-Packard Europhysics Prize, Japan Prize, Welch Award, Wolf Prize in Chemistry, Karl Ziegler Preis, C. F. Gauss-, Liebig-, Mittasch-, Bunsen-, Engler-Medaille, Dr. h.c. Univ. Bochum und Münster, Gr. Bundesverdienstkreuz, Mitglied der Berlin-Brandenb., der Bayer. und der Nordrhein-Westf. Akad. d. Wissenschaften, der Academia Europaea und der Leopoldina, sowie der Royal Society of Edinburgh und der American Academy of Arts and Sciences, u.a.

Sonderfunktionen:

Vizepräsident der DFG; Vorsitzender des Preisträger-Auswahlausschusses der Humboldt-Stiftung; Gastprofessor am California Institute of Technology und der University of California, Berkeley; Honorarprofessor an der FU, TU und HU Berlin, u.a.

Kooperationen: Zahlreiche.

Forschungsschwerpunkte:

- Mechanismen heterogen katalysierter Reaktionen [1,2]: Aufklärung der Elementarprozesse durch Einsatz von Rastertunnelmikroskopie (STM) und andere Oberflächenphysikalische Methoden.
- Dynamik von Oberflächenprozessen [3-5]: Einsatz von Kurzzeit-Lasertechniken und anderen zeitauflösenden Methoden.
- Elektrochemie [6,7]: Veränderung der Festkörper/Flüssigkeit-Grenzfläche mit hoher Orts- und Zeitauflösung.
- Selbstorganisation bei Oberflächenreaktionen [8,9]: Verifizierung von Konzepten der Nichtlinearen Dynamik.
- Clusterphysik [10]: Nichtadiabatische Prozesse bei der Agglomeration von Metallclustern.

(Die Nummern beziehen sich auf die nachfolgende Literaturlauswahl)

Ausgewählte Publikationen:

- [1] H. Over, Y. D. Kim, A. P. Seitsonen, S. Wendt, E. Lundgren, M. Schmid, P. Varga, A. Morgante and G. Ertl
“Atomic-scale structure and catalytic reactivity of the $RuO_2(110)$ surface”,
Science **287**, 1474-1476 (2000).
- [2] S. Völkening, K. Bedürftig, K. Jacobi, J. Winterlin and G. Ertl
“Dual-path mechanism for catalytic oxidation of hydrogen on platinum surfaces”,
Phys. Rev. Lett. **83**, 2672-2675 (1999).
- [3] G. Ertl
“Dynamics of reactions at surfaces”,
Adv. Catalysis **45**, 1-69 (2000).
- [4] M. Bonn, S. Funk, C. Hess, D. N. Denzler, C. Stampfl, M. Scheffler, M. Wolf and G. Ertl
“Phonon-versus electron-mediated desorption and oxidation of CO on $Ru(0001)$ ”,
Science **285**, 1042-1045 (1999).
- [5] S. Renisch, R. Schuster, J. Winterlin and G. Ertl
“Dynamics of adatom motion under the influence of mutual interactions”,
Phys. Rev. Lett. **82**, 3839-3842 (1999).
- [6] R. Schuster, V. Kirchner, P. Allongue and G. Ertl
“Electrochemical micromachining”,
Science **289**, 98-101 (2000).
- [7] R. Schuster, V. Kirchner, X. H. Xia, A. M. Bittner and G. Ertl
“Nanoscale electrochemistry”,
Phys. Rev. Lett. **80**, 5599-5602 (1998).
- [8] J. Christoph, P. Strasser, M. Eiswirth and G. Ertl
“Remote triggering of waves in an electrochemical system”,
Science **284**, 291-293 (1999).
- [9] M. Hildebrand, M. Kuperman, H. Wio, A. S. Mikhailov and G. Ertl
“Self-organized chemical nanoscale microreactors”,
Phys. Rev. Lett. **83**, 1475-1478 (1999).
- [10] L. König, I. Rabin, W. Schulze and G. Ertl
“Chemiluminescence in the agglomeration of metal clusters”,
Science **274**, 1353-1355 (1996).

Dr. Christian Frischkorn

Arbeitsgebiet: Oberflächenphysik, Ultrakurzzeitdynamik an Grenzflächen

Kurzbiographie:

Geboren 1966, Physikstudium 1986 - 1993 an der TU Darmstadt, 1993 – 1994 Gastaufenthalt am Joint Laboratory for Quantum Optics der East China Normal University und der Academia Sinica in Shanghai, Doktorarbeit am Max-Planck-Institut für Strömungsforschung in Göttingen bei Prof. U. Buck zum Thema "Photodissoziation von HBr-Molekülen und HBr-Clustern", Promotion 1997, Postdoc 1998 - 2000 bei Prof. D. M. Neumark an der University of California at Berkeley, ab November 2000 Habilitand bei Prof. M. Wolf am Fachbereich Physik der FU Berlin.

Auszeichnungen:

Forschungsstipendium der Deutschen Akademie der Naturforscher Leopoldina 1998 - 2000.

Forschungsschwerpunkte:

Schwingungs- und Reaktionsdynamik adsorbierter Moleküle und transienter Produkte an Grenzflächen sollen mit der zeitaufgelösten Infrarot-Spektroskopie in Echtzeit nachverfolgt werden. Dabei wird in einer optischen Pump-Probe-Anordnung die Summenfrequenz-erzeugung als Probe-Methode eingesetzt. Dieser nichtlinearer Prozess an der Oberfläche detektiert Änderungen der Vibrations- und elektronischen Eigenschaften des Adsorbat-Substrat Komplexes. Probenpräparation und Experimente geschehen im Ultrahochvakuum.

Während der Doktorarbeit und der Postdoc-Zeit standen Gasphasenexperimente an neutralen und geladenen Molekülen und Clustern im Vordergrund. So wurden z.B. in der Arbeit bei Prof. D. Neumark die physikalischen und chemischen Eigenschaften geladener Cluster in Abhängigkeit ihrer Größe mit der Methode der zeitaufgelösten Photoelektronenspektroskopie studiert. In Zukunft sollen diese Erfahrungen sowohl in der Frequenz- als auch in der Zeitdomäne auf dem Gebiet der Molekül- und Clusterphysik in Femtosekundenexperimenten an Molekülen auf Oberflächen eingesetzt werden. Folgende Projekte wurden bisher untersucht:

- Dissoziationsmechanismen isolierter und in Clustern eingebetteter Moleküle (clustergrößenabhängige Rekombination der Fragmente und Energietransfer zwischen Fragmenten und Solvatmolekülen).
- Zeitaufgelöste Dynamik der Elektronensolvatation in polaren und unpolaren Clustern (Schwelleneffekte im Übergang vom einzelnen Atom zur kondensierten Phase).
- Femtosekunden-Relaxationsdynamik in gröÙenselektierten Clustern nach Schwingungs- oder elektronischer Anregung.

Ausgewählte Publikationen:

R. Baumfalk, U. Buck, C. Frischkorn, S.R. Gandhi, and C. Lauenstein

UV photolysis of (HBr)_n clusters with known size distribution,

Chem. Phys. Lett. **269**, 321 (1997).

- R. Baumfalk, U. Buck, C. Frischkorn, S.R. Gandhi, and C. Lauenstein
Photodissociation and size analysis of (HBr)_n clusters,
Ber. Bunsenges. Phys. Chem. **101**, 606 (1997).
- R. Baumfalk, U. Buck, C. Frischkorn, N.H. Nahler, and Hüwel, L.
Photodissociation of HBr molecules and clusters: Anisotropy parameters, branching ratios, and kinetic energy distributions, J. Chem. Phys. **111**, 2595 (1999).
- L. Lehr, M.T. Zanni, C. Frischkorn, R. Weinkauff, and D.M. Neumark
Electron solvation in finite systems: Femtosecond dynamics of iodide (water)_n anion clusters,
Science **284**, 635 (1999).
- A.V. Davis, M.T. Zanni, C. Frischkorn, and D.M. Neumark
Time-resolved dynamics of the charge-transfer-to-solvent states in solvated iodide clusters,
J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **108**, 203 (2000).
- M.T. Zanni, C. Frischkorn, A.V. Davis, and D.M. Neumark
Dynamics of the charge-transfer-to-solvent states in $\Gamma(\text{Xe})_n$ clusters,
J. Phys. Chem. A **104**, 2527 (2000)
- M.T. Zanni, A.V. Davis, C. Frischkorn, M. Elhanine, and D.M. Neumark
Femtosecond stimulated emission pumping: Characterization of the I_2^- ground state,
J. Chem. Phys. **112**, 8847 (2000)
- A.V. Davis, M.T. Zanni, C. Frischkorn, M. Elhanine, and D.M. Neumark
Femtosecond stimulated emission pumping: Dynamics of vibrational energy loss in excited $\text{I}_2^- (\text{CO}_2)_4$ clusters, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom., im Druck (2000)
- C. Frischkorn, M.T. Zanni, A.V. Davis, and D.M. Neumark
Electron solvation dynamics in $\Gamma(\text{NH}_3)_n$ clusters,
Discuss. Faraday Soc. **115**, 49 (2000)

Dr. Martín Garcia

FU Berlin

- 12/1984 **Diplomprüfung** am Instituto Balseiro, Bariloche, Argentinien.
- 03/1985 – Postgraduierten-Ausbildung an der nationalen Kommission
03/1987 für Kernenergie, Abteilung Festkörperphysik. Teilnahme an
Spezialvorlesungen.
- 2/1992 **Disputation** am Institut für Theoretische Physik der Freien
Universität Berlin.
- 2/1992- Wissenschaftlicher Mitarbeiter (mit Lehrverpflichtungen) am
2/1997 Institut für Theoretische Physik der Freien Universität Berlin.
- 9/1995 - Gastprofessor am Institut für Kern-, Atom- und Molekül-
10/1995 Physik der Universidad de las Islas Baleares, Palma de
Mallorca, Spanien.
- 9/1996 Gastprofessor am Institut für Kern-, Atom- und Molekül-Physik der
Universidad de las Islas Baleares, Palma de Mallorca, Spanien.
- 3/1997-6/1997 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Born-Institut für
Nichtlineare Optik und Ultrakurzzeitspektroskopie, Abteilung
Cluster und Oberflächen.
- 7/1997-6/2003 Wissenschaftlicher Assistent am Institut für Theoretische Physik der
Freien Universität Berlin.
- 7/1998 Gastprofessor am Institut für Kern-, Atom- und Molekül-Physik der
Universidad de las Islas Baleares, Palma de Mallorca, Spanien.
- 2/1999-5/1999 Gastwissenschaftler am Department of Physics and Astronomy of
the Michigan State University, East-Lansing, USA.
- 7/1999 **Habilitation** (Theoretische Physik) am Fachbereich Physik der
Freien Universität Berlin.
- 12/1999 – Gastprofessor am Departamento de Física Teórica, Universidad de
5/2000 Valladolid, Spanien.
- 10/2000 – (C4-Stelle) am Institut für Physik der Ernst-Moritz-Arndt-
4/2001 Universität Greifswald.

Ausgewählte Publikationen (M. E. Garcia)

Theory for the Optical Absorption in Small Clusters: Dependence on Atomic Structure and Cluster Size

S. Grabowski, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. Lett. **72**, 3969 (1994).

Alternative Microscopic Approach to the Photoabsorption of Small Clusters,

S. Grabowski, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Modern Physics Letters B **10**, 241 (1996).

Theory for the Ultrafast Structural Response of Optically Excited Small Clusters: Time Dependence of the Ionization Potential,

H. O. Jeschke, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. A **54**, R4601 (1996) (Rapid Communication).

Theory for the spin-dependent photoacoustic response to circularly polarized X-rays: How to detect Magnetism by Using a Microphone,

M. E. Garcia, Ch. Brouder and K. H. Bennemann,
Solid State Commun. **103**, 331 (1997).

Femtosecond Neutralization Dynamics in Cluster-Solid Surface Collisions,

Bu. Wrenger and K. H. Meiwes-Broer, O. Speer and M. E. Garcia,
Phys. Rev. Lett. **79**, 2562 (1997).

Influence of Chaos on the Ionization Induced Fragmentation Dynamics of van der Waals Clusters,

M. E. Garcia, D. Reichardt and K. H. Bennemann,
J. Chem. Phys. **107**, 9857 (1997).

Nonradiative Deexcitation Time Scales of Spherical Metal Clusters,

M. E. Garcia, Ll. Serra, F. Garcias and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. B **57**, 4895 (1998).

Theory for the ultrafast melting and fragmentation dynamics of small clusters after femtosecond ionization,

M. E. Garcia, D. Reichardt and K. H. Bennemann,
J. Chem. Phys. **109**, 1101 (1998).

Temperature and Size Dependence of the Optical Response of Small Ag_n Clusters,

T. Zabel, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Eur. Phys. J. D **7**, 219-227 (1999).

Theoretical Study of the Laser-Induced Femtosecond Dynamics of Small Si_n Clusters,

K. Zickfeld, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. B **59**, 13422 (1999).

Microscopic analysis of the laser induced femtosecond graphitization of diamond,
H. O. Jeschke, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Phys. Rev. B **60**, R3701 (1999) (Rapid Communication).

Interplay between emission of electrons and quiresonant ultrafast electron tunneling in cluster-surface collisions,
O. Speer, M. E. Garcia, B. Wrenger and K. H. Meiwes-Broer,
Surf. Sci. **443**, 195 (1999).

Theory for Laser Induced Ultrafast Phase Transitions in Carbon,
H. O. Jeschke, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Appl. Phys. A **69**, 49 (1999).

Photon assisted Stückelberg oscillations in a double quantum dot,
O. Speer, M. E. Garcia and K. H. Bennemann,
Phys. Phys. B **62**, 2630 (2000).

An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system,
I. Grigorenko and M. E. Garcia,
Physica A **284**, 131 (2000).

Professor Robert Benny Gerber

Hebrew University Israel, Department of Physical Chemistry

Short Overview

B. Gerber B.Sc., D. Phil, Fiedler Professor of Theoretical Chemistry

Academic Training

B.Sc. in Chemistry (with excellence) Hebrew University of Jerusalem, Israel, 1965

D.Phil. University of Oxford, England, 1968 Thesis supervisor: Professor C.A. Coulson

Senior Mathematics Prize (for thesis research), University of Oxford, 1968

Academic Experience

Postdoctoral Research Associate (with Professor Martin Karplus) Harvard University 1968 to 1969

Senior Scientist, Weizmann Institute of Science, Rehovot, Israel, 1969-1975

Associate Professor of Chemistry, Hebrew University of Jerusalem, 1976-1980

Professor of Chemistry, Hebrew University, from 1980 Saerree K. and Louis P. Fiedler Chair in Chemistry,

Hebrew University, from 1989

Professor of Chemistry, University of California, Irvine, from 1989

Present Positions

Professor of Theoretical and Physical Chemistry, and Saerre K. and Louis P. Fiedler Chair in Chemistry,

Hebrew University of Jerusalem, Israel

Professor of Chemistry, University of California, Irvine, U.S.A.

Current Research Group

(At The Hebrew University and at The University of California, Irvine)

Dr. A. Tamar Yinnon, Postdoctoral Research Fellow; Dr. Avraham Rom, Postdoctoral Research Fellow; Dr. Jan Lundell, Postdoctoral Research Fellow; Dr. Susan Gregurick, Postdoctoral Research Fellow; Daniel Hamburger, Ph.D. Student; Sharon Broude, Ph.D. Student; Erick Fredj, Ph.D. Student; Joon Oh Jung, Ph.D. Student; Eric Altshuler, Ph.D. Student; David Chase, Ph.D. Student; Masha Niv, Ph.D. Student; Yossi Antakolich, M.Sc. Student

Former Group Members: Anna Krylov, PhD

Honors and Awards

Graham Senior Scholarship, Pembroke College, University of Oxford, elected 1966
Senior Mathematical Prize, University of Oxford, 1968
Fellow of The American Physical Society, elected 1989
Michael Milken Prize for long-standing excellence in teaching, Hebrew University, 1990
Recipient of the Max-Planck Research Award (given by the Alexander von Humboldt Foundation, Federal Republic of Germany), 1991
Recipient of the I.M. Kolthoff Prize in Chemistry (given by the Technion-Israel Institute of Technology) 1992
Recipient of the Medal of the University of Helsinki and Rector's invited lecturer, University of Helsinki, Finland, 1993.

Editorial Boards

Member, Editorial Board, Isr. J. Chem., 1980-1985
Member, Editorial Board of Molecular Physics (Europhysics Journal based in England), 1980-1988
Member, Editorial Board of Laser Chemistry (International Journal based in France) from 1985
Member of the Editorial Board of Computational Materials Science (an International Journal published by Elsevier) from 1992
Associate Editor "Advanced Series in Physical Chemistry", Review Series World Scientific Press, from 1992
Member of the Editorial Board, Berichte der Bunsengesellschaft für Physikalische Chemie (an International Journal based in Germany) from 1994

Special Lectures

Tri-University (UCLA-CALTECH-USC) Joint Seminar in Chemistry, February 1982
Fritz Haber Memorial Lecture, Technische Universität München, Germany, Feb. 1989
Lectures in Physical Chemistry, University of Colorado, Boulder, July 1992
Rector's Invited Lecturer, University of Helsinki, Finland, December 1993

MOST INTERESTING PUBLICATIONS OF THE PAST 5 YEARS

- (1) P. Jungwirth and R.B. Gerber
Quantum Dynamics of Large Polyatomic Systems Using a Classically-Based Separable Potential Method
J. Chem. Phys. **102**, 6046-6056 (1995).
- (2) A. Roitberg, R.B. Gerber, R. Elber and M.A. Ratner
Anharmonic Wave Functions of Proteins: Quantum Self Consistent Field Calculations of BPTI
Science **268**, 1319-1322 (1995).
- (3) A. I. Krylov, R.B. Gerber, M.A. Gaveau, J.M. Mestdagh, B. Schilling and J.P. Visticot
Spectroscopy, Polarization and Non-Adiabatic Dynamics of Electronically Excited $\text{Ba}(\text{Ar})_n$ Clusters: Theory and Experiment
J. Chem. Phys. **104**, 3651-3663 (1996).
- (4) A.I. Krylov, R.B. Gerber and R.D. Coalson
Nonadiabatic Dynamics and Electronic Energy Relaxation of $\text{Cl}(^2)$ Atoms in Solid Ar
J. Chem. Phys. **105**, 4626-4635 (1996).
- (5) J.O. Jung and R.B. Gerber
Vibrational Wavefunctions and Spectroscopy of $(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=2,3,4,5$: Vibrational SCF with Correlation Corrections
J. Chem. Phys. **105**, 10332-10347 (1996).
- (6) A.T. Yinnon, D.A. Lidar-Hamburger, I. Farbman, R.B. Gerber, P. Zeppenfeld, M.A. Krzyrowski and G. Comsa
He Scattering from Random Adsorbates, Disordered Compact Islands and Fractal Submonolayers: Intensity Manifestations of Surface Disorder
J. Chem. Phys. **106**, 4228-4242 (1997).
- (7) A.I. Krylov and R.B. Gerber
Photodissociation Dynamics of HCl in Solid Ar: Cage Exit, Nonadiabatic Transitions and Recombination
J. Chem. Phys. **106**, 6574-6587 (1997).
- (8) R.B. Gerber, P. Jungwirth, E. Fredj and A.Y. Rom
Quantum Molecular Dynamics Simulations of Processes in Large Clusters: Methods and Applications, in *Modern Methods for Multidimensional Dynamics Computations in Chemistry*, edited by D.L. Thompson. (World Scientific Publishing, Singapore, (1998), 238-265.
- (9) E. Fredj, R.B. Gerber and M.A. Ratner
Quantum-Mechanical Simulations of Inelastic Scattering in Collisions of Large Clusters: $\text{Ar}+(\text{H}_2\text{O})_{11}$
J. Chem. Phys. **109**, 4833-4842 (1998).

- (10) J.N. Harvey, J.O. Jung and R.B. Gerber
Ultraviolet Spectroscopy of Water Clusters: Excited States and Absorption Lineshapes of $(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=2-6$
J. Chem. Phys. (Communications) **109**, 8747-8750 (1998).
- (11) G.M. Chaban, J.O. Jung and R.B. Gerber
Ab Initio Calculation of Anharmonic Vibrational States of Polyatomic Systems: Electronic Structure Combined with Vibrational SCF
J. Chem. Phys. **111**, 1823-1829 (1999).
- (12) G. M. Chaban, J.O. Jung and R.B. Gerber
Anharmonic Vibrational Spectroscopy of Hydrogen-Bonded Systems Directly Computed from ab initio Potential Surfaces: $(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=2,3$; $\text{Cl}^-(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=1,2$; $\text{H}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, $n=1,2$; $\text{H}_2\text{O}-\text{CH}_3\text{OH}$
J. Phys. Chem. A **104**, 2772-2779 (2000).
- (13) E.M. Knipping, M.J. Lakin, K.L. Foster, P. Jungwirth, D.J. Tobias, R.B. Gerber, D. Dabdub and B.J. Finlayson-Pitts
Experiments and Molecular/Kinetics Simulations of Ion-Enhanced Interfacial Chemistry on Aqueous NaCl Aerosols
Science **288**, 302-306 (2000).
- *(14) J. Lundell, G.M. Chaban and R.B. Gerber
Anharmonic Vibrational Spectroscopy Calculations for Novel Rare-gas Containing Compounds: HXeH , HXeCl , HXeBr and HXeOH
J. Phys. Chem. A **104**, 1944-1952 (2000).
- *(15) MY. Niv, M. Bargheer and R.B. Gerber
Photodissociation and Recombination of F_2 Molecules in Ar_{54} Cluster: Nonadiabatic Molecular Dynamics Simulations
J. Chem. Phys. (In press).

* Indicates papers acknowledging support by Sfb 450.

Dr. Peter Hamm

Max-Born-Institut

Kurzbiographie:

Geboren 6.4.1966 in München, 1985-1991 Studium der Physik an der Technischen Universität München, 1991-1995 Promotion an der Ludwig Maximilians Universität München bei Prof. W. Zinth, 1995-1996 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Ludwig Maximilians Universität München bei Prof. W. Zinth, 1996-1998 Postdoc an der University of Pennsylvania bei Prof. R. M. Hochstrasser, seit 1999 Abteilungsleiter am Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Abteilung C1: Femtosekunden-dynamik molekularer Systeme, Projektleiter: Femtobiologie.

Forschungsschwerpunkte:

Strukturelle Dynamik und Dissipation molekularer Systeme in Lösung, mit Schwerpunkt auf fundamentale Prozesse in Biomoleküle. Methodenentwicklung zur nichtlinearen Femtosekunden-Infrarot Spektroskopie.

Kooperationen:

Prof. Dr. G. Stock, Universität Frankfurt, Prof. Dr. D. Seebach, ETH Zürich, Prof. S. Mukamel, University of Rochester, Prof. R. M. Hochstrasser, University of Pennsylvania, Prof. P. Kim, MIT, Dr. G. Haran, Weizmann Institute.

Ausgewählte Veröffentlichungen

1. P. Hamm, C. Lauterwasser, W. Zinth
Generation of tunable subpicosecond light pulses in the midinfrared between 4.5 and 11.5 μm .
Opt. Lett. **18** (1993) 1943-1945.
2. P. Hamm, S. Wiemann, M. Zurek, W. Zinth
A highly sensitive multichannel spectrometer for subpicosecond spectroscopy in the midinfrared
Opt. Lett. **19** (1994) 1642-1644.
3. P. Hamm, M. Zurek, W. Mäntele, M. Meyer, H. Scheer, W. Zinth
*Femtosecond infrared spectroscopy of reaction centers from *Rhodobacter sphaeroides* between 1000 and 1800 cm^{-1} .*
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **92** (1995) 1826-1830.
4. P. Hamm
Coherent effects in femtosecond infrared spectroscopy
Chem. Phys. **200** (1995) 415-429.
5. P. Hamm, S. Ohline, W. Zinth
Vibrational cooling of azobenzene after photoisomerisation measured by femtosecond IR spectroscopy.
J. Chem. Phys. **106** (1997) 519-529.

6. P. Hamm, M. Zurek, T. Röschinger, H. Patzelt, D. Oesterhelt, W. Zinth
Subpicosecond infrared spectroscopy of the photoisomerisation of the protonated Schiff base of all-trans-retinal
Chem. Phys. Lett. **268** (1997) 180-186.
7. P. Hamm, M. Lim, R. M. Hochstrasser
Vibrational energy relaxation of the cyanide ion in water
J. Chem. Phys. **107** (1997) 10523-10531.
8. P. Hamm, M. Lim, R. M. Hochstrasser
The structure of the amide I band of peptides measured by femtosecond nonlinear IR spectroscopy
J. Phys. Chem. **102** (1998) 6123-6138.
9. P. Hamm, M. Lim, R. M. Hochstrasser
Non-Markovian dynamics of the vibrations of ions in water from femtosecond infrared three pulse photon echoes
Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 5326-5329.
10. M. Lim, P. Hamm, R. M. Hochstrasser
Protein fluctuations are sensed by stimulated infrared echoes of the vibrations of carbon monoxide and azide probes
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **95** (1998) 15315-15320.
11. P. Hamm, M. Lim, W. F. DeGrado, R. M. Hochstrasser
The two-dimensional IR nonlinear spectroscopy of a cyclic penta-peptide in relation to its three-dimensional structure.
Proc. Natl. Acad. Sci. USA **96** (1999) 2036-2041.
12. P. Hamm, M. Lim, R. M. Hochstrasser
Stimulated photon echoes from amide I vibrations
J. Phys. Chem. A **103** (1999) 10049-10053.
13. P. Hamm, M. Lim, W. F. DeGrado, R. M. Hochstrasser
Pump/probe-self heterodyned 2D spectroscopy of vibrational transitions of a small globular peptide
J. Chem. Phys. **112** (2000) 1907-1916.
14. S. Woutersen, P. Hamm
Structure determination of trialanine in water using polarization sensitive 2D vibrational spectroscopy
J. Phys. Chem B (2000) in press.
15. P. Hamm, R. A. Kaindl, J. Stenger
Noise suppression in femtosecond mid-IR light sources
Opt. Lett. (2000) accepted except for minor revisions.

Prof. Dr. Ingolf V. Hertel

Max-Born-Institut/FU Berlin

Arbeitsgebiet: Experimentalphysik, Chemische Physik, Ultrakurzzeitphysik

Kurzbiografie:

1941 geboren in Dresden, 1963-1967 Studium in Lübeck (ing. grad.) und Freiburg (Dipl. Phys.), 1969 Promotion Universität Freiburg (Prof. H. Ehrhardt), 1969- 1970. Akademische Laufbahn: Assistent am Institut für Physik, Universität Mainz, 1970 – 1978, Wiss. Rat/Abteilungsleiter und Professor, Universität Kaiserslautern, 1978 Ordentlicher Professor für Experimentalphysik, Freie Universität Berlin, 1986 – 1993 Ordinarius für Experimentalphysik an der Universität Freiburg, seit 01.05.1992, Direktor, Max-Born-Institut, Berlin-Adlershof, seit Juli 1993 Universitätsprofessor (C4-S) FB Physik der Freien Universität Berlin. Auslandsaufenthalte: 1967-1968 Dept. of Physics, Southampton University, England, 1973, Gastprofessor Universidad Nacional, Bogota, Kolumbien, 1983/1984 Visiting Fellow, JILA, Boulder Col., USA, 1990 Laboratoire Aimé Cotton (CNRS), Orsay, Frankreich. Wissenschaftsorganisatorische Arbeit: 1970 – 1978 Mitwirkung am Aufbau der Universität Kaiserslautern, 1971 Erster Dekan des Fachbereiches Physik, ebenda, 1975 – 1987 Gremien der "International Conference on the Physics of Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC) , 1977 + 1978 Sprecher des ersten Kaiserslauterner Sonderforschungsbereiches, 1981 – 1989 Atomic Physics Board der European Physical Society, 1985 – 1986 Federführung bei der Beantragung des Berliner Sonderforschungsbereiches 337, 1986 – jetzt Editor in Chief der Zeitschrift für Physik D, Atoms, Molecules and Clusters bzw. The European Journal of Physics; 1989 – 1993 Berichterstatter für die Sonderforschungsbereiche der Deutschen Forschungsgemeinschaft, 1987 – 1993 Planung, Beantragung und Aufbau eines interdisziplinären Freiburger Materialforschungszentrums (FMF), Gründungsdirektor des FMF zusammen mit H. J. Cantow und K. W. Benz, 1990 – 1992 Dekan bzw. Prodekan der Fakultät für Physik der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg/Br., seit Sommer 1992 Sprecher der außeruniversitären Forschungs-Einrichtungen in Adlershof (IGAFA), 1995 – 1998 Erster Präsident der Wissenschaftsgemeinschaft bis Gottfried Wilhelm Leibniz (WGL, vormals Blaue Liste), 1.10.1998-17.1.2000 Staatssekretär des Landes Berlin für Wissenschaft und Forschung, seit Mai 1999 Mitglied des Bundesfachausschusses Forschung und Innovation der CDU, seit Aug. 2000 Gesamtkoordinator des Kompetenznetzes für Optische Technologien "Optec-Berlin-Brandenburg". Mitgliedschaften, Ehrungen: seit 1970 Deutsche Physikalische Gesellschaft,

seit 1980 European Physical Society, 1995 "The James Franck Memorial Lecture" Israelien Academy of Science and Humanities, Jerusalem, seit Juni 1997 Ordentliches Mitglied der Berlin-Brandenburgischen Akademie der Wissenschaften,

Die 15 wichtigsten Publikationen seit 1995

- [147] A. Goerke, G. Leipelt, G. Palm, C. P. Schulz and I. V. Hertel; Reactive Scattering of Sodium Clusters with Molecular Oxygen, *Z Phys. D* **32** (1995) 311-20.
- [148] H. Steger, J. Holzapfel, A. Hielscher, W. Kamke and I. V. Hertel; Single Photon Ionization of Higher Fullerenes C_{76} , C_{78} and C_{84} : Determination of Ionization Potentials, *Chem. Phys. Lett.* **234** (1995) 455-9.
- [159] T. Freudenberg, W. Radloff, H.-H. Ritze, V. Stert, K. Weyers, F. Noack and I. V. Hertel; Ultrafast Fragmentation and Ionisation Dynamics of Ammonia Clusters, *Z. Phys. D* **36** (1996) 349-64.
- [160] N. Andersen, K. Bartschat, J. T. Broad and I. V. Hertel; Collisional Alignment and Orientation of Atomic outer shells III: Spin-Resolved Excitation, *Phys. Rep.* **279** (1997) 251-398.
- [162] O. Kittelmann, J. Ringling, A. Nazarkin, G. Korn and I. V. Hertel; Direct Observation of Coherent Medium Response under the Condition of Two-Photon Excitation of Krypton by Femtosecond UV-Laser Pulses, *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 2682-5.
- [165] N. Andersen, J. T. Broad, E. E. B. Campbell, J. W. Gallagher and I. V. Hertel; Collisional alignment and orientation of atomic outer shells II. Quasi-molecular excitation, and beyond, *Phys. Rep.* **278** (1997) 107-290.
- [166] R. Tellmann, N. Krawez, S.-H. Lin, I. V. Hertel and E. E. B. Campbell; Endohedral fullerene production, *Nature* **382** (1996) 407-8.
- [174] C. P. Schulz, J. Höhdorf, P. Brockhaus and I. V. Hertel; Fragmentation of $Na(NH_3)_n^+$ cluster ions, *Z. Phys. D* **40** (1997) 78-80.
- [177] T. Freudenberg, W. Radloff, H.-H. Ritze, V. Stert, F. Noack and I. V. Hertel; Ultrafast dynamics in ammonia clusters: Analysis of protonated and unprotonated cluster ion signals, *Z. Phys. D* **41** (1997) 267-73.

- [179] I. V. Hertel, C. P. Schulz, A. Goerke, H. Palm and G. Leipelt; Fragmentation Analysis of Size Selected Sodium Clusters, *J. Chem. Phys.* **107** (1997) 3528-41.
- [186] V. Stert, W. Radloff, C.-P. Schulz and I. V. Hertel; Ultrafast photoelectron spectroscopy: Femtosecond pump-probe coincidence detection of ammonia cluster ions and electrons, *Eur. Phys. J. D* **5** (1999) 97-106.
- [192] P. Brockhaus, I. V. Hertel and C. P. Schulz; Electronically excited states in size selected solvated alkali metal atoms III: depletion spectroscopy of $\text{Na}(\text{NH}_3)_n$ -clusters, *J. Chem. Phys.* **110** (1999) 393-402.
- [203] F. Stienkemeier, F. Meier, A. Hägele, H. O. Lutz, E. Schreiber, C. P. Schulz and I. V. Hertel; Coherence and relaxation in potassium-doped superfluid helium droplets studied by femtosecond pump-probe spectroscopy, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 2320-3.
- [208] E. E. B. Campbell, K. Hansen, K. Hoffmann, G. Korn, M. Tchapyguine and I. V. Hertel; From above threshold ionization to statistical electron emission: The laser pulse duration dependence of C_{60} photoelectron spectra, *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 2128-31.
- [210] I. V. Hertel, R. Stoian, A. Rosenfeld, D. Ashkenasi and E. E. B. Campbell; Surface and bulk ultra-short pulsed laser processing of transparent materials, in *The first international symposium on laser precision microfabrication* **4088**, K. Sugioka, I. Miyamoto, and T. W. Sigmon eds. (SPIE - The International Society for Optical Engineering, in press) Vol. 4088.

Dr. Arthur Hotzel

FU Berlin

Arbeitsgebiet: Oberflächenphysik, Ultrakurzzeitdynamik an Grenzflächen

Kurzbiographie:

Geboren 1967, Physikstudium 1988-1994 an den Universitäten Bonn und Heidelberg, Doktorarbeit am Fritz-Haber-Institut der MPG bei Prof. G. Ertl zum Thema "Femtosekunden-Elektronendynamik der Adsorbat-bedeckten Cu(111)-Oberfläche", Promotion 1999, seit Februar 2000 Postdoc bei Prof. Wilson Ho an der Cornell-Universität (bzw. seit August 2000 University of California at Irvine), ab April 2001 Habilitand bei Prof. M. Wolf am Fachbereich Physik der FU Berlin.

Auszeichnungen:

Feodor-Lynen-Stipendium der Alexander-von-Humboldt-Stiftung 2000.

Forschungsschwerpunkte:

Dynamik von elektronischen und molekularen Anregungsprozessen an Festkörper-Grenzflächen und in dünnen Schichten. Mit optischen Pump-Probe-Methoden unter Verwendung von Femtosekunden-Lasern werden die elementaren Abläufe direkt in der Zeitdomäne beobachtet. Probenpräparation und Experimente geschehen im Ultrahochvakuum. In der Arbeit mit dem Rastertunnelmikroskop mit Prof. W. Ho soll die Dynamik einzelner organischer Moleküle studiert werden. Für die Zukunft wird angestrebt, die Untersuchungen auf strukturierte Oberflächen und Nanopartikel auszudehnen. Bisherige Projekte umfassten:

- _ Relaxationsdynamik angeregter ("heißer") Elektronen in Metallen im oberflächennahen Bereich.
- _ Detaillierter Nachweis des optischen Anregungsmechanismus von elektronischen Oberflächenzuständen der Kupfer(111)-Oberfläche.
- _ Einfluss von physisorbierten Adsorbatschichten auf die Dynamik metallischer Oberflächenzustände und deren Kopplung an Kernbewegungen der adsorbierten Moleküle.

Ausgewählte Publikationen:

- E. Knoesel, A. Hotzel, T. Hertel, M. Wolf, and G. Ertl,
Dynamics of photoexcited electrons in metals studied with time-resolved two-photon photoemission, Surf. Sci. **368**, 76 (1996).
- T. Hertel, E. Knoesel, A. Hotzel, M. Wolf, and G. Ertl,
Femtosecond time-resolved photoemission of electron dynamics in surface Rydberg states, J. Vac. Soc. Technol. A **15**, 1503 (1997).
- A. Hotzel, K. Ishioka, E. Knoesel, M. Wolf, and G. Ertl,
Can We Control Lifetimes of Electronic States at Surfaces by Adsorbate Resonances?, Chem. Phys. Lett. **285**, 271 (1998).
- E. Knoesel, A. Hotzel, M. Wolf, and G. Ertl,
Temperature dependence of surface state lifetimes, dephasing rates and binding energies on Cu(111) studied with time-resolved photoemission, J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom. **88-91**, 577 (1998).
- E. Knoesel, A. Hotzel, and M. Wolf,
Ultrafast dynamics of hot electrons and holes in copper: Excitation, energy relaxation, and transport effects, Phys. Rev. B **57**, 12812 (1998).
- L. Bartels, G. Meyer, K.-H. Rieder, D. Velic, E. Knoesel, A. Hotzel, M. Wolf, and G. Ertl,
Dynamics of Electron-Induced Manipulation of Individual CO Molecules on Cu(111), Phys. Rev. Lett. **80**, 2004 (1998).
- D. Velic, A. Hotzel, M. Wolf, and G. Ertl,
Electronic states of the C₆H₆/Cu{111} system: Energetics, femtosecond dynamics, and adsorption morphology, J. Chem. Phys. **109**, 9155 (1998).
- M. Wolf, A. Hotzel, E. Knoesel, and D. Velic,
Direct and indirect excitation mechanisms in two-photon photoemission spectroscopy of Cu(111) and CO/Cu(111), Phys. Rev. B **59**, 5926 (1999).
- A. Hotzel, G. Moos, K. Ishioka, M. Wolf, and G. Ertl,
Femtosecond electron dynamics at adsorbate-metal interfaces and the dielectric continuum model, Appl. Phys. B **68**, 615 (1999).
- A. Hotzel, M. Wolf, and J. P. Gauyacq,
Phonon-mediated intraband relaxation of image state electrons in adsorbate overlayers: N₂/Xe/Cu(111), J. Phys. Chem. B (in press).

Dr. G. Korn

Max-Born-Institut

Die wichtigsten Forschungsinteressen der letzten Jahre beinhalten:

Erzeugung und Anwendung ultrakurzer Lichtimpulse mit hohen mittleren und hohen Spitzenleistungen. Dabei stehen insbesondere folgende Schwerpunkte im Mittelpunkt:

Physik der Laser bei der Generation und Verstärkung von extrem kurzen ($< 100\text{fs}$) Impulsen. Hierbei sind die Untersuchung von Prozessen bei der Erzeugung von Impulsen mit nur einer elektromagnetischen Schwingung mit eingeschlossen.

Im Bereich der Verstärkung von kurzen Impulsen werden Untersuchungen an Lasern mit CPA-Technik zur Erzeugung hoher mittlerer und hoher Peakleistung durchgeführt.

Nichtlinear optische Methoden zur Erzeugung von extrem kurzer Strahlung im UV und VUV Bereich werden untersucht, um zu neuen abstimmbaren kohärenten Impulsquellen zu gelangen. Bei der Anwendung dieser Strahlung zum Studium der Ausbreitung von intensiven fs-Laserimpulsen in Luft konnten erstmalig Effekte der Selbstkanalisierung über lange Distanzen nachgewiesen und erklärt werden. Erstmalig konnte gezeigt werden, daß fs-Laserimpulse durch Umgehung der Aufheizung des Materials eine hohe Präzision bei der Mikromaterialbearbeitung besitzen. Die Anwendung dieser Quellen schließt die Ultrakurzzeitspektroskopie an kleinen Molekülen und Clustern ein.

Kurze Impulsen werden hinsichtlich ihres Phasengangs und der Impulsbreite mittels neuer nichtlinearer Methoden untersucht und die Techniken zur Charakterisierung dieser Impulse weiterentwickelt.

Mittels eines neuen Regimes der stimulierten Ramanstreuung wurden neuartige Methoden der Impulserzeugung vorgeschlagen, detailliert physikalisch beschrieben und experimentell realisiert. Dabei konnten die weltweit kürzesten Impulse im Bereich um 400nm (5.8fs) generiert und charakterisiert werden.

Im Rahmen des SFB wurden Untersuchungen zur Erzeugung und Anwendung von amplituden- und phasenmodulierten verstärkten fs-Impulsen begonnen und die Verwendung von adaptiv gesteuerten Methoden experimentell zur Optimierung der Phase von verstärkten Impulsen demonstriert.

Im Bereich der Wechselwirkung von intensiver fs-Laserstrahlung sind Untersuchungen zur Erzeugung Kurzpulsröntgenquellen mit hoher Folgefrequenz und deren Anwendungen für die zeitaufgelöste Spektroskopie im keV-Bereich ein zentraler Schwerpunkt gegenwärtiger und zukünftiger Arbeiten.

Mitarbeit in internationalen Gremien:

- member of the organizing committee CLEO-Europe 1998 (ultrafast optics)
- CLEO 2000 (High field lasers, Physics and fusion technology)
- CLEO-Europe 2000 (chair of ultrafast optics)

ausgewählte, wichtige Publikationen der letzten Jahre:

D. Du, X. Liu, G. Korn, J. Squier, G. Mourou

Laser-induced breakdown by impact ionization in SiO₂ with pulse widths from 7 ns to 150 fs
Applied Physics Letters 64(1994) 3071

C. J. Chien, G. Korn, S. Coe, J. Squier, G. Mourou, S. Craxton

Highly efficient second harmonic generation of ultra-intense Nd : glass laser pulses
Optics Letters, 20(1995), pp. 353-355

A. Braun, G. Korn, X. Liu, D. Du, J. Squier, G. Mourou

Self-channeling of high peak-power femtosecond laser pulses in air
Optics Letters, 20(1995), pp.73-75

J. Squier, S. Kane, G. Korn, G. Mourou

TW Ti:sapphire laser with spherical reflective optic pulse expander
Optics Letters 20(1995)2114

Z.Jiang, J.C. Kieffer, J. P. Matte, M. Chaker, G. Korn, A. Maksimchuk, S. Coe, G. Mourou

X-ray spectroscopy of hot solid density plasmas produced by subpicosecond high contrast laser pulses at 10^{18} - 10^{19} Wcm²

Plasma Physics, 2, (1995), p. 1702

C. P. J. Barty , G. Korn, F. Raksi, C. Rose-Petruck, J. Squier, A. C. Tien, K. R. Wilson, V. V. Yakovlev, K. Yamakawa

Regenerative pulse shaping and amplification of ultrashort optical pulses
Optics Letters, 21 (1996) 219

- O. Kittelmann, J. Ringling, G. Korn, A. Nazarkin
Generation of broadly tunable femtosecond VUV pulses
Optics Letters 21(1996)1159
- O. Kittelmann, J. Ringling, G. Korn, A. Nazarkin, I. V. Hertel
Direct observation of coherent medium response under the condition of two-photon excitation of Kr by femtosecond UV pulses
Phys. Rev. Lett. 76(1996)2682
- G. Korn, E. Nibbering, O. Dühr
Generation of intense tunable 20fs pulses near 400nm using a gas filled hollow waveguide
Optics Letters 22(1997)1335
- A. Nazarkin, O. Kittelmann, J. Ringling, G. Korn, I. V. Hertel
Fs-pulse two-photon resonant difference-frequency mixing in gases: a technique for tunable VUV fs-pulse generation and a spectroscopic tool for studying atoms in strong laser fields
Phys. Rev. A 55 (1997), 671-684
- A. Nazarkin, G. Korn
Coherent propagation effects and pulse self-compression under the conditions of two-photon resonant difference frequency mixing
Phys. Rev. A 56 (1997), 5187-5190
- A. Nazarkin, G. Korn
Raman self-conversion of femtosecond laser pulses and generation of single-cycle radiation
Phys. Rev. A 58 (1998), R61-R64
- G. Korn, O. Dühr, A. Nazarkin
Observation of raman-self-conversion of fs-pulse frequency due to impulsive excitation of molecular vibrations
Phys. Rev. Lett. 81 (1998), 1215-1216
- O. Dühr, E. T. J. Nibbering, G. Korn
Generation of intense 8 fs pulses around 400 nm at 1kHz by use of a gas-filled hollow waveguide
Opt. Lett. 24 (1999), 34-36
- A. Nazarkin, G. Korn, M. Wittmann, T. Elsaesser
Generation of multiple phase-locked Stokes and Antistokes lines in an impulsively excited raman medium
Phys. Rev. Lett. 83 (1999), 2560

A. Nazarkin, G. Korn

Pulse self-compression in the sub-carrier cycle regime

Phys. Rev. Lett. 83 (1999), 4748

R. Moshhammer et. al.

Momentum distributions of Ne^{n+} ions created by an intense ultrashort laser pulse

Phys. Rev. Lett. 84, (2000), 447

E. Campbell, K. Hansen, K. Hoffmann, G. Korn et. al.

From above threshold ionization to statistical electron emission:

the laser pulse duration dependence C60 photoelectron spectra

Phys. Rev. Lett. 84, (2000), 2128

M. Wittmann, A. Nazarkin, G. Korn

fs- Puls synthesis using phase modulation by impulsively excited molecular vibrations

Phys. Rev. Lett. 84 (2000), 5508

Prof. Dr. Jörn Manz

FU Berlin

Arbeitsgebiet: Theoretische Chemie: Theorie zur molekularen Reaktionsdynamik

Kurzbiografie:

1947 geboren in Hamburg, 1966-70 Physikstudium an den Universitäten Hamburg und München, 1970-72 Dissertation in Theoretischer Chemie bei Prof. L. Hofacker, TU München, 1972-74 und 1976-85 wissenschaftlicher Assistent TU München, 1974-75 PostDoc bei Prof. R. D. Levine, Weizmann Institute Rehovoth, Israel, 1975-76 PostDoc bei Prof. D. J. Diestler, TU München, 1978 Habilitation, 1981 Privat-Dozent, 1983 Akad. Oberrat a. Z., 1985-92 Fiebiger-Professur (C3) für Theoretische Chemie, Universität Würzburg, 1992- Professor (C4) für Theoretische Chemie, Freie Universität Berlin, Institut für Chemie. 1993-99 Direktor des Instituts für Physikalische und Theoretische Chemie, FU Berlin. 1994-2001 Koordinator (Chemie), gemeinsam mit Prof. H.-J. Korsch (Physik, Universität Kaiserslautern): Schwerpunktprogramm (SPP) „Zeitabhängige Phänomene und Methoden in Quantensystemen der Physik und Chemie“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft DFG. 2000 gewählter Fachgutachter der DFG für Theoretische Chemie.

Stipendien:

- 1966-72 Stipendium der Studienstiftung des deutschen Volkes
- 1974-75 Minerva-Stipendium
- 1976-78 Habilitationsstipendium (DFG)
- 1984-88 Chemie-Dozenten-Stipendium des Verbandes der Chemischen Industrie

Drittmittelprojekte:

- 1998- Sfb 450 „Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen“, Teilprojekt TP1
- 1999-01 Deutsch/Japanisches Kooperationsprojekt „Quantentheorie der Laserkontrolle von Enantiomer-selektiven Reaktionen“ (DFG/JSPS) (Kooperation mit Y. Fujimura, Tohoku Universität, Sendai)

Arbeitsgruppe (Stand: Oktober 2000)

- Gastwissenschaftler, Habilitanden, Systemadministrator: Dr. G. K. Paramonov (Humboldt), Dr. M. V. Korolkov, Dr. L. Gonzalez (C1); Dr. O. Kühn (Sfb 450), Dr. M. Oppel (FUB)
- Doktoranden: J. Full, D. Kröner, H. Naundorf, M. Schröder
- Diplomanden und studentische Mitarbeiter: F. Grzegorzewski, O. Karge, P. Krause

Arbeitsgebiet:

Theorie zur molekularen Reaktionsdynamik, Femtosekundenchemie, Laserpulskontrolle (vgl. ausgewählte Publikationen der Arbeitsgruppe 1995-2000)

Kooperationen:

- Im Zusammenhang mit dem Sfb 450: u.a. mit R. B. Gerber (TPC1, Jerusalem), L. Wöste und S. Vajda (TPA1) N. Schwentner und P. Dietrich (TPA3), T. Elsässer (TPB2) M. Weitzel (TPA6), B. Schmidt und C. Schütte (TPC6), V. May (TPC3), C. Daniel (Stasbourg), N. Makri (Urbana), K. Seppelt (FU Berlin).
- Weitere Kooperationen u.a. mit: H.-H. Limbach (FU Berlin, DFG, beantragt), T. Takatzuka (Tokyo, DFG, beantragt), Y. Y. Yan (Hongkong).

Ausgewählte Publikationen:

- [1] J. Manz and L. Wöste: „Femtosecond Chemistry“, Vol. 1+2, *Verlag Chemie*, Weinheim, (1995).
- [2] C. Daniel, M.-C. Heitz, J. Manz and C. Ribbing: “Spin-Orbit Induced Radiationless Transitions in Organometallics: Quantum Simulation of the $^1E \rightarrow ^3A_1$ Intersystem Crossing Process in $HCo(CO)_4$ ”, *J. Chem. Phys.*, **102**, 905-912 (1995).
- [3] J. Manz, P. Saalfrank and B. Schmidt: "Quantum Dynamical Aspects of Rotationally and Vibrationally Mediated Photochemistry in Matrices and at Surfaces: HCl/DCl in Ar, and NH_3/ND_3 at Cu (111)", *Faraday Transactions*, **93**, 957-967 (1997).
- [4] R. S. Berry, V. Bonaèia-Koutecký, J. Gaus, Th. Leisner, J. Manz, B. Reischl-Lenz, H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber, St. Vajda, R. de Vivie-Riedle, S. Wolf and L. Wöste: "Size Dependent Ultrafast Relaxation Phenomena in Metal Clusters", *Adv. Chem. Phys.*, **101**, 101-132 (1997).
- [5] M. V. Korolkov, J. Manz and G. K. Paramonov: "Theory of Laser Control of Vibrational Transitions and Chemical Reactions by Ultrashort Infrared Laser Pulses", *Adv. Chem. Phys.*, **101**, 327-343 (1997).

- [6] J. Manz: "Molecular Wavepacket Dynamics: Theory for Experiments 1926-1996", in V. Sundström, Ed. "*Femtochemistry and Femtobiology: Ultrafast Reaction Dynamics at Atomic-Scale Resolution*", Nobel Symposium **101**" (Imperial College Press, London 1997), pp. 80-318.
- [7] J. Manz, K. Sundermann and R. de Vivie-Riedle: „Quantum Optimal Control Strategies for Photoisomerization via Electronically Excited States“, *Chem. Phys. Lett.*, **290**, 415-422 (1998) .
- [8] N. Došliã, O. Kühn, J. Manz and K. Sundermann: „The ‚HydrogenSubway‘ – A Tunneling Approach to Intramolecular Hydrogen Transfer Reactions Controlled by Ultrashort Laser Pulses“, *J. Phys. Chem.*, **A 102**, 9645-9650 (1998).
- [9] Y. Zhao and O. Kühn: „Selective Infrared Laser Pulse Control of H and CO Branching in the Ground State Photodissociation of HCo(CO)₄: A Two-Dimensional Model Simulation“, *Chem. Phys. Letters* **302**, 7-14 (1999).
- [10] Y. Fujimura, L. González, K. Hoki, J. Manz, and Y. Ohtsuki: "Selective Preparation of Enantiomers by Laser Pulses: Quantum Model Simulations for H₂POSH", *Chem. Phys. Letters*, 306, 1-8 (1999); Corrigendum, *Chem. Phys. Letters*, **310**, 578-579 (1999).
- [11] O. Kühn and N. Makri: “Forward-Backward Semiclassical Calculation of Spectral Lineshapes: I₂ in a Rare Gas Cluster”, *J. Phys. Chem. A*, **103**, 9487-9493 (1999).
- [12] M. Oppel and G.K. Paramonov: “Picosecond Laser Control of Bond-Selective Dissociation and Clockwise and Anticlockwise Rotation of the Dissociation Fragments: Application to a Three-Dimensional Model of HONO₂ in the Ground Electronic State”, *Chem. Phys.*, **250**, 131-143 (1999).
- [13] A. Orel, Y. Zhao and O. Kühn: “Laser Driven Ground State Photodissociation of HCo(CO)₄: An ab initio Quantum Molecular Dynamics Approach”, *J. Chem. Phys.*, **112**, 94-100 (2000).
- [14] R. B. Gerber, M. V. Korolkov, J. Manz, M. Y. Niv und B. Schmidt: „A Reflection Principle for the Control of Molecular Photodissociation in Solids: Model Simulation for F₂ in Ar“, *Chemical Physics Letters*, im Druck.
- [15] Y. Fujimura, L. González, K. Hoki, D. Kröner, J. Manz und Y. Ohtsuki: „From a Racemate to a Pure Enantiomer by Laser Pulses: Quantum Model Simulations for H₂POSH“, *Angewandte Chemie*, im Druck.
- [16] A. Bartelt, C. Daniel, J. Full, L. González, M. Krenz, C. Lupulescu, J. Manz, M. Oppel, P. Rosendo-Francisco, S. Vajda, L. Wöste: "Analysis and control of ζ^5 -CpMn(CO)₃ fragmentation processes", *Chem. Phys.* (2000) submitted.

Dr. habil. Volkhard May

HU Berlin

Arbeitsgebiet: Theorie von Transferprozessen in molekularen Nanostrukturen

Kurzbiographie

geboren am 22. März 1954; verheiratet; zwei Kinder; 1960 bis 1972: Schulbesuch; 1972 bis 1977: Studium der Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin; dort von 1978 bis 1982 wissenschaftlicher Mitarbeiter im Bereich *Theoretische Halbleiterphysik*; dort 1981 Promotion zum Thema *Zur Theorie optischer Eigenschaften von Halbleitern*; 1982 bis 1987: wissenschaftlicher Mitarbeiter, Bereich *Theoretische Physik*, Pädagogische Hochschule Güstrow; 1985: Aufenthalt an der Universität Moskau, Lehrstuhl für Quantenradiophysik (L. V. Keldysh); 1987: Habilitation Physik zum Thema *Kinetik und nichtlineare Optik exzitonischer Systeme*; 1987 bis 1991: wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Molekularbiologie, Berlin, Abteilung Biomolekularelektronik; 1988, 1989: Aufenthalt am Institut für Chemische Physik, Moskau; 1990, 1991 Aufenthalt am Institut für Physikalische Chemie, Universität Mainz; dort 1992 Integrationsstipendiat der Alexander von Humboldt-Stiftung; 1992 bis 1996: Förderung im Wissenschaftler-Integrations-Programm, Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin; 1993: Aufenthalt an der Universität Rochester (S. Mukamel), seit 1997 wissenschaftlicher Oberassistent (C2) am Institut für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin;

Kooperationen

Prof. V. Sundström (Lund), Prof. E. G. Petrov (Kiew), Prof. M. Schreiber (Chemnitz),

Forschungsschwerpunkte

- Grundlagen der dissipativen Quantendynamik
- Kontrolle molekularer Dynamik durch äußere Felder
- Elektronentransfer in Donator-Akzeptorsystemen und Proteinen
- Proton- und Zweiproton-Dynamik in molekularen Systemen
- Exzitonendynamik in Farbstoff-Komplexen und photosynthetischen Antennensystemen

Wichtige Veröffentlichungen der letzten 5 Jahre

D. Malzahn and V. May: *Floquet-Analysis of Vibrational State Preparation in an Open Molecular System*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29**, 2739 (1996).

Th. Renger and V. May: *Multiple Exciton Effects in Molecular Aggregates: Application to a Photosynthetic Antenna Complex*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3406 (1997).

I. A. Goychuk, E. G. Petrov, and V. May: *Control of Long-Range Electron Transfer in Dynamically Disorder Molecular Systems by an External Periodic Field*, J. Chem. Phys., **106**, 4522 (1997).

E. G. Petrov, I. S. Tolokh, and V. May: *Magnetic Field Control of Electron Motion in Molecular Nanostructures: Step-Like Behavior and Spin Polarization of a Bridge-Assisted Inter-Electrode Current*, Phys. Rev. Lett. **79**, 4006 (1997).

D. Schirrmeister and V. May: *Femtosecond Pulse Dependence of Dissipation in Molecular Systems*, Chem. Phys. Lett. **297**, 383 (1998).

Th. Renger and V. May: *Simulations of Frequency-Domain Spectra: Structure-Function Relationships in Photosynthetic Pigment-Protein Complexes*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5228 (2000).

Th. Renger, V. May, and O. Kühn: *Ultrafast Excitation Energy Transfer Dynamics in Photosynthetic Pigment-Protein Complexes*, Phys. Rep., (in press).

Bücher:

G. Mahler, V. May, and M. Schreiber (eds.): *Molecular Electronics: Properties, Dynamics, and Applications*, Marcell Dekker, Inc., New York, 1996.

V. May and O. Kühn: *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems A Theoretical Introduction*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.

Dr. Erik T. J. Nibbering

Max-Born-Institut

Kurzbiographie:

Geboren 1965 in Zaandam, die Niederlande, 1983-1988 Studium der Chemie an der Vrije Universiteit Amsterdam, 1988 Diplom in Chemie, 1993 Promotion an der Rijksuniversiteit Groningen, die Niederlande, bei Prof. Douwe Wiersma, 1993-1995 Postdoc Laboratoire d'Optique Appliquée - E.N.S.T.A. - École Polytechnique, Palaiseau, Frankreich, seit 1995 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Born-Institut für Nichtlineare Optik und Kurzzeitspektroskopie, Berlin, seit 1997 Projektleiter "Molekulare Reaktions- und Schwingungsdynamik in der kondensierten Phase " am Max-Born-Institut.

Forschungsschwerpunkte:

Erzeugung ultrakurzer Lichtimpulse in UV und MIR-Bereich, Lichtimpulscharakterisierung, nichtlineare Propagationseffekte und Ultrakurzzeitspektroskopie kondensierter Materie: Ultrakurzzeitdynamik von Wasserstoffbrücken in Flüssigkeiten und Lösungen, chemische Elementarreaktionen in der kondensierten Phase, Flüssigkeitsdynamik.

Kooperationen:

Zahlreiche Kooperationen mit Universitäten und Forschungsinstituten im In- und Ausland.

Ausgewählte Veröffentlichungen (1990-2000)

1. E. T. J. Nibbering, D. A. Wiersma, K. Duppen: *Femtosecond non-Markovian optical dynamics in solution.*, Phys. Rev. Lett. 66, 2464 (1991).
2. E. T. J. Nibbering, D. A. Wiersma and K. Duppen: *Ultrafast nonlinear spectroscopy with chirped optical pulses*, Phys. Rev. Lett. 68, 514-517 (1992).
3. E. T. J. Nibbering, D. A. Wiersma, K. Duppen: *Ultrafast electronic fluctuation and solvation in liquids*, Chem. Phys. 183, 167 (1994).
4. D. von der Linde, T. Engers, G. Jenke, P. Agostini, G. Grillon, E. Nibbering, A. Mysyrowicz, A. Antonetti: *Generation of high order harmonics from solid surfaces by intense femtosecond laser pulses*, Phys. Rev. A 52, R25 (1995).
5. E. T. J. Nibbering, P. F. Curley, G. Grillon, B. S. Prade, M. A. Franco, F. Salin, A. Mysyrowicz: *Conical emission from self-guided femtosecond pulses in air*, Opt. Lett. **21**, 62-64 (1996).

6. E. T. J. Nibbering, M. A. Franco, B. S. Prade, G. Grillon, J. -P. Chambaret, A. Mysyrowicz: *Spectral determination of the amplitude and the phase of intense optical pulses*, J. Opt. Soc. Am. B 13, 317 (1996).
7. E. T. J. Nibbering, G. Grillon, M. A. Franco, B. S. Prade and A. Mysyrowicz: *Determination of the inertial contribution to the nonlinear refractive index of air, N₂ and O₂ by use of unfocused high-intensity femtosecond laser pulses*, J. Opt. Soc. Am. B 14, 650 (1997).
8. H. R. Lange, A. Chiron, E. T. J. Nibbering, G. Grillon, J. -F. Ripoche, M. A. Franco, B. Lamouroux, B. S. Prade, A. Mysyrowicz: *Anomalous long range propagation of femtosecond laser pulses through air: moving focus or pulse selfguiding?*, Opt. Lett. 23, 120 (1998).
9. E. T. J. Nibbering, O. Dühr, G. Korn: *Generation of intense tunable 20-fs pulses near 400 nm using a gas-filled hollow waveguide*, Opt. Lett. 22,1335 (1997).
10. C. Chudoba, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser: *Site-specific excited-state solute-solvent interactions probed by femtosecond vibrational spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. 81, 3010 (1998).
11. C. Chudoba, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser: *Ultrafast structural response of hydrogen bonded complexes to electronic excitation in the liquid phase*, J. Phys. Chem. A 103, 5625 (1999)
12. E. T. J. Nibbering, C. Chudoba, T. Elsaesser: *Hydrogen-bond dynamics and solvation of electronically excited states determined by femtosecond vibrational spectroscopy*, Isr. J. Chem. 39, 333 (1999).
13. C. Chudoba, A. Kummrow, J. Dreyer, J. Stenger, E. T. J. Nibbering, T. Elsaesser, K. Zachariasse: *Excited state structure of 4-dimethylamino-benzonitrile studied by femtosecond mid-infrared spectroscopy and ab-initio calculations*, Chem. Phys. Lett. 309, 357 (1999).
14. F. Tschirschwitz, E. T. J. Nibbering: *Femtosecond pump-probe and grating scattering study of condensed phase hydrogen-bonding dynamics of complexes of coumarin 102*, Chem. Phys. Lett. 312, 169 (1999).
15. E. T. J. Nibbering, F. Tschirschwitz, C. Chudoba, T. Elsaesser: *Femtochemistry of hydrogen-bonded complexes after electronic excitation in the liquid phase: the case of coumarin 102*, J. Phys. Chem. A 104, 4236 (2000).

Prof. Dr. Wolfgang Radloff

Max-Born-Institut

Wissenschaftlicher Werdegang

Physikstudium 1958-1963 an der Technischen Universität Dresden, 1963-1991 wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Deutschen Akademie der Wissenschaften/Akademie der Wissenschaften der DDR, 1969 Promotion an der Humboldt-Universität Berlin zum Thema „Zur Interferenz unabhängiger Lichtstrahlen geringer Intensität,, ab 1975 Leiter einer wissenschaftlichen Abteilung im Zentralinstitut für Optik und Spektroskopie, 1980 Promotion B (Habilitation) an der Friedrich-Schiller-Universität Jena zum Thema „Nicht-lineare Absorptionsspektroskopie von Kohlenwasserstoffmolekülen bei der Wellenlänge 3,39 μm ,,, 1989 Ernennung zum Professor an der Akademie der Wissenschaften, ab 1992 Leiter einer wissenschaftlichen Abteilung im neu gegründeten Max-Born-Institut, 1991-1998 Leiter des Teilprojekts „Wechselwirkung von Clustern mit angeregten Molekülen und mit ultrakurzen Lichtimpulsen,, im Sfb 337, ab 1998 Leiter des Teilprojekts „Steuerung ultraschneller photoinduzierter chemischer Elementarprozesse in freien Metall-Molekülkomplexen und Molekülclustern,, im Sfb 450.

Wichtigste Publikationen 1996-2000

- 1) T. Freudenberg, W. Radloff, H.-H. Ritze, V. Stert, K. Weyers, F. Noack and I. V. Hertel; *Ultrafast Fragmentation and Ionisation Dynamics of Ammonia Clusters* Z. Phys. D **36** (1996) 349-64.
- 2) H.-H. Ritze and W. Radloff; *Ab initio study of AgNH₃ and its cation* Chem. Phys. Lett. **250** (1996) 415-20.
- 3) W. Radloff, T. Freudenberg, V. Stert, H.-H. Ritze, F. Noack and I. V. Hertel; *Cluster size dependence of the internal conversion in highly excited benzene (NH₃)_n clusters* Chem. Phys. Lett. **264** (1997) 210-4.
- 4) T. Freudenberg, V. Stert, W. Radloff, J. Ringling, J. Gütde and I. V. Hertel; *Ultrafast dynamics of ammonia clusters excited by femtosecond VUV laser pulses* Chem. Phys. Lett. **269** (1997) 523-9.
- 5) V. Stert, W. Radloff, T. Freudenberg, F. Noack, I. V. Hertel, C. Jouvét, C. Dedonder-Lardeux and D. Solgadi; *Femtosecond time-resolved photoelectron spectra of ammonia molecules and clusters* Europhys. Lett. **40** (1997) 515-20.
- 6) W. Radloff, V. Stert, T. Freudenberg, I. V. Hertel, C. Jouvét, C. Dedonder-Lardeux and D. Solgadi; *Internal conversion in the highly excited benzene and benzene dimer: Analysis of femtosecond time-resolved photoelectron spectra* Chem. Phys. Lett. **281** (1997) 20-6.

- 7) P. Farmanara, V. Stert and W. Radloff; *Ultrafast internal conversion and fragmentation in electronically excited C₂H₄ and C₂H₃Cl molecules*
Chem. Phys. Lett. **288** (1998) 518-22.
- 8) W. Radloff, P. Farmanara, V. Stert, E. Schreiber and J. R. Huber; *Ultrafast photodissociation dynamics of electronically excited CF₂I₂ molecules*
Chem. Phys. Lett. **291** (1998) 173-8.
- 9) V. Stert, W. Radloff, C.-P. Schulz and I. V. Hertel; *Ultrafast photoelectron spectroscopy: Femtosecond pump-probe coincidence detection of ammonia cluster ions and electrons*
Eur. Phys. J. D **5** (1999) 97-106.
- 10) V. Stert, P. Farmanara, W. Radloff, F. Noack, S. Skowronek, J. Jimenez and A. Gonzalez-Urena; *Real-time study of the femtosecond harpooning reaction of Ba...FCH₃*
Physical Review A, RC **59, 3** (1999) R1727-30.
- 11) P. Farmanara, W. Radloff, V. Stert, H.-H. Ritze and I. V. Hertel; *Real-time observation of hydrogen transfer: Femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy in excited ammonia dimer*
J. Chem. Phys. **111** (1999) 633-42.
- 12) P. Farmanara, V. Stert and W. Radloff; *Ultrafast predissociation and coherent phenomena in CS₂ excited by femtosecond laser pulses at 194...207nm*
J. Chem. Phys. **111** (1999) 5338-43.
- 13) P. Farmanara, O. Steinkellner, M. Wick, M. Wittmann, G. Korn, V. Stert and W. Radloff; *Ultrafast internal conversion and photodissociation of molecules excited by femtosecond 155nm laser pulses*
J. Chem. Phys. **111** (1999) 6264-70.
- 14) P. Farmanara, V. Stert and W. Radloff; *Ultrafast photodissociation dynamics of acetone excited by femtosecond 155nm laser pulses*
Chem. Phys. Lett. **320** (2000) 697-702.
- 15) V. Stert, P. Farmanara and W. Radloff; *Electron configuration changes in excited pyrazine molecules analysed by femtosecond time resolved photoelectron spectroscopy*
J. Chem. Phys. **112** (2000) 4460-4.
- 16) P. Farmanara, V. Stert, H.-H. Ritze and W. Radloff; *Analysis of the ultrafast photodissociation of electronically excited CF₂I₂ molecules by femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy*
J. Chem. Phys. **113** (2000) 1705-13
- 17) W. Radloff; *Femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy of molecules and clusters by photoion-photoelectron coincidence detection*
in Adv. Ser. in Phys. Chem., Vol. **10A** Photoionization and Photodetachment, C. Y. Ng ed. (World Scientific Publ. Co., 2000) 127- 81.

PD Dr. Burkhard Schmidt

FU Berlin

Wissenschaftliche- und Lehrtätigkeit

- seit 02/2000 Oberassistent (C2)
Freie Universität (Berlin), Fachbereich Mathematik und Informatik
Abteilung "Scientific Computing" (Prof. Dr. Ch. Schütte)
- 03/1999-01/2000 Wissenschaftlicher Mitarbeiter
Konrad-Zuse-Zentrum Berlin für Informationstechnik (Berlin)
Abteilung "Scientific Computing" (Prof. P. Deuflhard)
- seit 02/1999 Privatdozent für das Fach "Theoretische Chemie"
Freie Universität (Berlin)
Fachbereich Biologie/Chemie/Pharmazie
- 12/1998 Habilitation im Fach "Theoretische Chemie"
Freie Universität (Berlin)
Thema: *Making and Breaking of Chemical Bonds: Dynamics of elementary reactions from gas phase to condensed phase*
- 04/1994-02/1999 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Lehrbeauftragter
Freie Universität (Berlin)
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie (Prof. J. Manz)
- 01/1994-03/1994 Wissenschaftlicher Mitarbeiter
- 03/1992-11/1992 Max-Planck-Institut für Strömungsforschung in Göttingen
Abteilung Atom- und Molekülphysik (Prof. U. Buck)

Auslandsaufenthalte

- 08/1997-09/1997 Gastwissenschaftler (DAAD Stipendiat)
- 08/1996-09/1996 University of California (Irvine, USA)
- 07/1993-10/1993 Department of Chemistry (Prof. R. B. Gerber)
- 11/1993-12/1993 Minerva-Stipendiat Hebrew University in Jerusalem
- 01/1993-06/1993 (Israel) Fritz-Haber Center for Molecular Dynamics (Prof. R. B. Gerber)
- 10/1988-12/1988 Gastwissenschaftler
University of Washington (Seattle, USA).
Department of Chemistry (Prof. R. O. Watts)

Studium

01.02.92	Promotionsprüfung. Note: ``Magna cum laude''
02/1988-02/1992	Dissertation am Max-Planck-Institut für Strömungsforschung Abteilung Atom- und Molekülphysik (Prof. U. Buck) Thema: Struktur und Spektren von Molekülclustern
02/1988	Diplomprüfung. Note: Sehr gut
11/1985-01/1988	Diplomarbeit am Max-Planck-Institut für Strömungsforschung Abteilung Atom- und Molekülphysik (Prof. U. Buck) Thema: Messungen differentieller, elastischer Wirkungsquerschnitte an den Systemen He-Kr, He-Xe
10/1984-01/1988	Hauptstudium der Physik Georg-August-Universität in Göttingen
10/1984	Vordiplomprüfung. Note: Sehr gut
10/1982-09/1984	Grundstudium der Physik Universität Osnabrück

Aktuelle Publikationen (B. Schmidt)

J. Manz, B. Proppe, and B. Schmidt

From Torsional Spectra to Hamiltonians and Dynamics: Effects of Coupled Bright and Dark States of 9-(N-Carbazolyl) Anthracene
Z. Phys. D **34**(2), 111-118 (1995)

K. Finger, C. Daniel, P. Saalfrank, and B. Schmidt

Non-adiabatic Effects in the Photodissociation and Electronic Spectroscopy of HMn(CO)₃(dab): Quantum Wave Packet Dynamics Based on ab-initio Potentials
J. Phys. Chem. **100**(9), 3368-3376 (1996)

R. S. Berry, B. Meißner, and B. Schmidt

Cluster Growth From the Gas Phase: Associative Collisions of Small Alkali Halide Aggregates
Z. Phys. Chem. **195**, 237-251 (1996)

- M. V. Korolkov, G. K. Paramonov, and B. Schmidt*
State-Selective Control For Vibrational Excitation and Dissociation of Diatomic Molecules With Shaped Ultrashort Laser Pulses
J. Chem. Phys. **105**(5), 1862-1879 (1996)
- B. Schmidt and P. Jungwirth*
Vibrational Line Shifts of Hydrogen Halides in a Rare Gas Environment: HF/DF and HCl/DCI in Ar Matrices and Clusters
Chem. Phys. Lett., **259**(1-2), 62-68 (1996)
- P. Nettesheim, F. A. Bornemann, B. Schmidt, and Ch. Schütte*
An Explicit and Symplectic Integrator for Quantum-Classical Molecular Dynamics
Chem. Phys. Lett. **256**(6), 581-588 (1996)
- M. V. Korolkov, J. Manz, G. K. Paramonov, and B. Schmidt*
Vibrationally State Selective Photoassociation by Infrared Picosecond Laser Pulses: Model Simulations for O + H -> OH(v)
Chem. Phys. Lett. **260**(5-6), 604-610 (1996)
- J. Manz, P. Saalfrank, and B. Schmidt*
Quantum Dynamical Aspects of Rotationally and Vibrationally Mediated Photochemistry in Matrices and at Surfaces: HCl/DCI in Ar, and NH₃/ND₃ at Cu(111)
J. Chem. Soc. Faraday Trans. **93**(5), 957-967 (1997)
- P. Backhaus and B. Schmidt*
Femtosecond Quantum Dynamics of Photoassociation Reactions: The Exciplex Formation of Mercury
Chem. Phys. **217**(2-3), 131-143 (1997)
- M. V. Korolkov and B. Schmidt*
Infrared Picosecond Laser Control of Acceleration of Neutral Atoms: Model Simulations for the Collision Pair O + H
Chem. Phys. Lett. **272**(1-2), 96-102 (1997)
- P. Backhaus, J. Manz, and B. Schmidt*
Effect of Rotations and Shape Resonances on Photoassociation and Photoacceleration by Ultrashort Infrared Laser Pulses
J. Phys. Chem. A **102** (23), 4118-4128 (1998)
- P. Jungwirth and B. Schmidt*
Quantum Dynamics Following Electron Photodetachment in the I⁻Ar₂ Complex: How Good are New Separable and Non-Separable Simulation Methods?
Chem. Phys. Lett. **275** (3-4), 127-136 (1997)
- S. Ring, B. Schmidt and H. Baumgärtel*
Ionization of Rydberg Atoms in THz-Laser Fields at the Transition from Low to High Scaled Frequencies
Eur. Phys. J. D **3**(2), 155-158 (1998)
- P. Jungwirth, B. Schmidt, and N. Moiseyev*
Vibrationally Resolved Spectra from Short Time Quantum Molecular Dynamics by the Filter-Diagonalization Method
Chem. Phys. Lett., **280**(3-4), 177-184 (1997)

- P. Jungwirth, P. Zdanska, and B. Schmidt*
Librational Control of Photochemical Reactions in Small Clusters
J. Phys. Chem. A **102**(37), 7241-7244 (1998)
- M. V. Korolkov and B. Schmidt*
Vibrationally State-Selective Laser Pulse Control of Electronic Branching in OH (X²Pi/A²Sigma⁺) Photoassociation
Chem. Phys. **237**(1-2), 123-138 (1998)
- B. Schmidt*
Quantum Dynamics of HF Photodissociation in Icosahedral Ar₁₂HF Clusters: Rotational Control of the Hydrogen Atom Cage Exit
Chem. Phys. Lett., **301**(3-4), 207-216 (1999)
- P. Zdanska, B. Schmidt, and P. Jungwirth*
Photolysis of Hydrogen Chloride Embedded in the First Argon Solvation Shell: Rotational Control and Quantum Dynamics of Photofragments
J. Chem. Phys. **110**(13), 6246-6256 (1999)
- P. Backhaus, B. Schmidt, and M. Dantus*
Control of Photoassociation Yield: A Quantum Dynamical Study of the Mercury System to Explore the Role of Pulse Duration from Nanoseconds to Femtoseconds
Chem. Phys. Lett. **306**(1-2), 18-24 (1999)
- B. Schmidt and P. Zdanska*
Solution of the Time-Dependent Schrödinger Equation for Highly Symmetric Potentials
Comp. Phys. Comm. **127**(2-3), 290-308 (2000)
- R. B. Gerber, M. V. Korolkov, J. Manz, M. Y. Niv, and B. Schmidt*
A Reflection Principle for the Control of Molecular Photodissociation in Solids: Model Simulation for F₂ in Ar
Chem. Phys. Lett. **327**(1-2), 76-84 (2000)
- P. Slavicek, M. Roeselova, P. Jungwirth, and B. Schmidt*
Preference of cluster isomers as a result of quantum delocalization: Potential energy surfaces and intermolecular vibrational states of Ne⁺HBr, Ne⁺HI, and HI(Ar)_n (n=1-6)
J. Chem. Phys., submitted

Prof. Dr. Christof Schütte

FU Berlin

1966	born in Warburg
since 1996	married to Ursula Stamm; children: Jana (*1999)
1972-1976	Elementary school, Warburg
1976-1985	Classical secondary school, Warburg
1985-1991	Studies in Physics and Computer Science, Universität Paderborn
1986-1992	Scholarship "Studienstiftung des deutschen Volkes"
1991	Diploma in Physics, Universität Paderborn (with J. Schröter)
1992-1994	Research Scientist at Konrad-Zuse Zentrum Berlin
1994	PhD in Mathematics, Freie Universität Berlin (with P. Deuffhard)
1994-1998	Research Assistant at Freie Universität Berlin
1998-1999	Head of the Department "Numerical Analysis and Modelling" at the Konrad-Zuse Zentrum
1999	Habilitation in Mathematics, Freie Universität Berlin
1999	Offer Full Professor, University of Duesseldorf, chair "Scientific Computing", not realized
since 2000	Full Professor (C4), Freie Universität Berlin, chair "Numerical Mathematics/Scientific Computing" with special emphasis on "Biocomputing"

Aktuelle Publikationen (Ch. Schütte)

Transfer Operator Approach to Conformational Dynamics in Biomolecular Systems

Ch. Schütte, W. Huisinga and P. Deuffhard

ZIB preprint, 1999

On Conformational Dynamics induced by Langevin Processes

Ch. Schütte and W. Huisinga,

ZIB preprint, 1999

Partial Wigner transforms and the quantum-classical Liouville equation

Ch. Schütte

ZIB Preprint, 1999

Identification of Almost Invariant Aggregates in Reversible Nearly Uncoupled Markov Chains

P. Deuffhard, W. Huisinga, A. Fischer, Ch. Schütte

Accepted in Linear Algebra Appl.

From Simulation Data to Conformational Ensembles: Structure and Dynamics based Methods

W. Huisinga, Ch. Best, R. Roitzsch, Ch. Schütte, and F. Cordes,

J. Comp. Chem. 20 (1999) pp. 1760-1774

A Direct Approach to Conformational Dynamics based on Hybrid Monte Carlo

Ch. Schütte, A. Fischer, W. Huisinga, P. Deuffhard,

J. Comp. Phys. 151 (1999) pp. 146-168

On Dynamical Transitions between Conformational Ensembles

Ch. Schütte, F. Cordes

To appear in the Proceedings of "Molecular Dynamics on Parallel Computers", Jülich (1999).

Adaptive Accuracy Control for Microcanonical Car-Parrinello Simulations

F.A. Bornemann, Ch. Schütte

Numer. Math. 83(2) pp. 179-186 (1999)

Faber and Newton Polynomial Integrators for Open-System Density Matrix Propagation

W. Huisinga, L. Pesce, R. Kosloff, P. Saalfrank

J. Chem. Phys. (110) 12, (1998).

On the Singular Limit of a Quantum-Classical Molecular Dynamics Model

F. Bornemann, Ch. Schütte

SIAM J. Appl. Math. 59(4), pp.~1208-1224 (1999)

A hybrid Monte Carlo method in a mixed-canonical ensemble for efficient conformational analysis of RNA

A. Fischer, F. Cordes and Ch. Schütte

J. Comp. Chem. 19(15), pp. 1689-1697 (1998)

A mathematical investigation of the Car-Parrinello Method

F. A. Bornemann and Ch. Schütte

Numer. Math. 78, pp. 359-376 (1998)

Homogenization of Hamiltonian Systems with a Strong Constraining Potential.

F. A. Bornemann and Ch. Schütte

Physica D 102, pp. 57-77 (1997)

Homogenization Approach to Smoothed Molecular Dynamics

Ch. Schütte and F.A. Bornemann

Nonlinear Analysis, Theory, Methods and Applications 30, pp. 1805-1814 (1997)

An explicit and symplectic integrator for quantum-classical molecular dynamics

P. Nettesheim, F. A. Bornemann, B. Schmidt, Ch. Schütte

J. Chem. Phys. Lett. 256, pp. 581-588 (1996)

Quantum-classical molecular dynamics as an approximation to full quantum dynamics

F. A. Bornemann, P. Nettesheim, Ch. Schütte

J. Chem. Phys. 105, pp. 1074-1083 (1996)

Dr. Claus Peter Schulz

Max-Born-Institut

Kurzbiographie:

Geboren 1953, Physikstudium 1973-1981 an der Technischen Universität Berlin, 1982-1987 Doktorand an der Freien Universität Berlin, 1987 Promotion an der Freien Universität Berlin zum Thema „Energietransfer und Photoionisation in Alkali-Molekül-Aggregaten“, 1987-1988 Postdoc am Joint Institute for Laboratory Astrophysics (JILA) in Boulder, USA, 1988-1993 wissenschaftlicher Assistent an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg, seit 1993 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Max-Born-Institut, 1992-1994 TP-Leiter SFB 276 Korrelierte Dynamik hochangeregter atomarer und molekularer Systeme, 1994-1998 TP-Leiter im SFB 337 Energie- und Ladungstransfer in molekularen Aggregaten, ab 1998 TP-Leiter im SFB 450 Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen.

Kooperationen:

Prof. B. Soep, Université Paris-Sud; Prof. K. Fuke, Universität Kobe; Prof. K. Hashimoto, Tokyo Metropolitan University; Prof. J.P. Scherman, Université Paris Nord; Dr. F. Stienkemeier, Universität Bielefeld.

Wichtige Publikationen:

- [1] C. Defrancois, H. Aboul-Carime, C.P. Schulz, J.P. Schermann; *Laser Separation of Geometrical Isomers of Weakly Bound Molecular Complexes* Science **269**, (1995) 1707-1709
- [2] C.P. Schulz, J. Höhndorf, P. Brockhaus, F. Noack, I.V. Hertel; *Ultrafast Dynamics in Small Alkali-Atom-Ammonia-Clusters* in "Structures and Dynamics of Clusters" edited by T. Kondow, K. Kaya, A. Terasaki Universal Academic Press, Tokyo (1996) Page. 191-198
- [3] C.P. Schulz, J. Höhndorf, P. Brockhaus, I.V. Hertel; *Fragmentation of $\text{Na}(\text{NH}_3)_n^+$ cluster ions* Z. Phys. D **40**, (1997) 78-80
- [4] I.V. Hertel, C.P. Schulz, A. Goerke, H. Palm, G. Leipelt; *Fragmentation Analysis of Size Selected Sodium Clusters* J. Chem. Phys. **107** (1997) 3528-3541
- [5] R. de Vivie-Riedle, S. Schulz, J. Höhndorf, C.P. Schulz; *Ultrafast excitation process in NaNH_3 : A combined theoretical and experimental analysis* Chem. Phys. **225** (1997) 299-308

- [6] C.P. Schulz, C. Nitsch; *Electronically excited states in size selected solvated alkali metal atoms II: Isotop effects in the Spectroscopy of Sodium Water and Sodium Ammonia Complexes*
J. Chem. Phys. **107** (1997) 9784-9800
- [7] C.P. Schulz, W. Radloff, I.V. Hertel; *Fast and ultrafast fragmentation and reaction dynamics in molecular clusters*
Il Nuovo Cimento **110A** (1998) 1227-1235
- [8] V. Stert, W. Radloff, C.-P. Schulz, I. V. Hertel; *Ultrafast photoelectron spectroscopy: Femtosecond pump-probe coincidence detection of ammonia cluster ions and electrons*
Eur. Phys. J. D **5** (1999) 97-106.
- [9] P. Brockhaus, I.V. Hertel, C.P. Schulz; *Electronically excited states in size selected solvated alkali metal atoms III: Depletion Spectroscopy of Na(NH₃)_n-Clusters*
J. Chem. Phys. **110** (1999) 393-402
- [10] C.P. Schulz, A. Scholz, I.V. Hertel; *Ultrafast reaction in solvated metal atom clusters: A dynamic study in the visible and near IR spectral range*
Ultrafast Phenomena XI (1998), 623-626
- [11] F. Stienkemeier, F. Meier, A. Hägele, H.O. Lutz, E. Schreiber, C.P. Schulz, I.V. Hertel; *Coherence and relaxation in potassium-doped superfluid helium droplets studied by femtosecond pump-probe spectroscopy*
Phys. Rev. Lett. **83** (1999), 2320-2323
- [12] F. Stienkemeier, P. Class, C.P. Schulz; *Decoherence of quantum interferences in potassium-doped Helium clusters*
Proceedings of the International Symposium on Clusters and Nanostructures World Scientific Publ. (2000) in press
- [13] B. Soep, M. Elhanine, C.P. Schulz; *Intracluster reactions of singly ionised magnesium atoms with dimethyl ether*
Chem. Phys. Lett. (2000) in press

Prof. Dr. Nikolaus Schwentner
FU Berlin

Arbeitsgebiet: Photoprozesse in Festkörpern

Lebenslauf und wissenschaftlicher Werdegang

Geboren 1945; Physikstudium 1965-1971 in München; Promotion 1975 an der Universität München mit Experimenten in Hamburg und Tel Aviv zum Thema "Photoemission vom Valenzband fester Edelgase und ihrer Mischungen"; 1975-1982 wissenschaftlicher Assistent an der Universität Kiel mit Experimenten in Kiel, am DORIS in Hamburg und am ACO in Paris zur Röntgenabsorptionsfeinstruktur für Strukturbestimmungen und zur lichtindizierten Fluoreszenz für die Untersuchung strahlungsloser Prozesse; Habilitation 1980 in Kiel zum Thema "Energiedissipation in festen und flüssigen Edelgasen".

Seit 1982 Professor am Fachbereich Physik der FU Berlin; Aufbau einer Forschungsgruppe zur Spektroskopie von Photoprozessen in Festkörpern mit Synchrotronstrahlung (BESSY), gepulsten Lasern und Elektronenstrahlen; 1982-1995 TP-Leiter im BFMT Verbund Synchrotronstrahlung. 1984-1986 TP-Leiter im SFB 6 Einfluß der Grenzfläche auf die elektronischen und vibronischen Zustände von Atomen, Atomaggregaten und Molekülen in Matrizen". 1987 - 1998 TP-Leiter im Sfb 337 "Energiedissipation und Photoreaktionen an Aggregaten von Metallatomen und kleinen Molekülen in Matrizen" und seit 1998 im Sfb450 »Analyse und Steuerung ultraschneller photoinduzierter Reaktionen« .Arbeiten auf den Gebieten strahlungslose Übergänge und photochemische Reaktionen an kleinen Molekülen in Matrizen, Lasermaterialien im UV und VUV Bereich sowie Mikrostrukturierung von Oberflächen durch photochemisches Trockenätzen.

Auszeichnungen, Ehrenämter, Gastprofessuren, Sonderfunktionen

- Visiting Professor an der Stanford University.
- und 1991 Guest Professor an der University of California at Irvine.
- Visiting Professor an der University of California in San Diego.
- Visiting Professor an der University of California in Irvine

- Seit 1983 Koordinator der BESSY-Experimente an der FU.
- Mitglied im BESSY Beirat Grundlagenforschung (1986-1990) und im Benutzerausschuß BESSY (1992-1995)
- Koordinator für INTAS-Projekte
- Seit 2000 Ansprechpartner im Kooperationsvertrag Kaiserslautern, BESSY, FU zum Bau und Betrieb eines 10mNIM Monokromators bei BESSYII
- Gutachter für DFG Einzel- und HBFEG- Anträge sowie BMFT, (Schwerpunkt Mikroskopie), National Science Foundation (USA), National Science Foundation (Israel), International Science Foundation, Chemical Physics, Chemical Physics Letters, Journal of Physical Chemistry, Journal of Physics, Journal of Chemical Physics and Surface Science.

Ausgewählte Publikationen der letzten 5 Jahre

1. Optimization of Exciton-Induced Detection of Atoms at Interfaces. Dickgießer, N. Schwentner: J. Phys. Chem. 104, 3743-3749 (2000)
2. Set-up combining Synchrotron radiation-induced photochemistry with IR probing: (HCl)_n in Kr Matrix. Dickgießer and N. Schwentner: Nucl. Instr. Meth. B, 168 , 252-267 (2000)
3. Amplification in Light-Induced Reactions of Cu with Cl₂ in the VUV. Raaf, M. Groen, N. Schwentner: Appl. Surf. Science, accepted
4. Extraction of potentials and dynamics from condensed phase pump-probe-spectra: Application to I₂ in Kr Matrices. Bargheer, P. Dietrich, K. Donovan and N. Schwentner: J. Chem. Phys. 111, 8556-8564 (1999)
5. Doped inert gas crystalline media for cryogenic lasers. Frankowski, G. Sliwinski, N. Schwentner: Proceedings of SPIE 3724, 362-367 (1998)
6. Molecular Photodynamics in Rare Gas Solids. Apkarian, N. Schwentner: Chemical Reviews 99, 1481-1514 (1999)
7. Photodynamics in superfluid helium; I: Femtosecond laser-induced ionization, charge recombination and preparation of molecular Rydberg states. Benderskii, R. Zadoyan, N. Schwentner and V.A. Apkarian: J. Chem. Phys. 110, 1542 (1999)
8. Empirical Jahn-Teller potential surfaces for silver doped Xenon matrices Dietrich, N. Schwentner: J. Chem. Phys. 111, 2133-2142 (1999)
9. Wavepacket diagnosis with chirped probe pulses. Zadoyan. N. Schwentner, V.A. Apkarian: Chem. Phys. 233 , 353-363 (1998)

10. Microstructuring of Si(100) by light induced dry etching in the VUV Streller, A. Krabbe, H. Raaf, N. Schwentner: Superlattices and Microstructures, 23 , 445-451 (1998)
11. Rydberg States in Quantum Crystals: NO in solid H₂ .Vigliotti, M. Chergui, M. Dickgießer and N. Schwentner: Faraday Transactions 108, 139-159 (1997)
12. Electron-lattice Dynamics on Jahn-Teller Surfaces in Ag:Xe Crystals Bammel, P. Dietrich, N. Schwentner: J. Chem. Phys. 111, 2123-2132 (1999)
13. Penetration Depth of Photomobilized F Atoms in Ar Layers from a Sandwich Experiment. Bressler, M. Dickgießer, N. Schwentner: J. Chem. Phys. 107, 10268-10277 (1997)
14. Photon-Induced Dry Etching of Si(100) in the VUV. Streller, B. Li, A. Krabbe, N. Schwentner: Appl. Surf. Science 96-98, 448-452 (1996)
15. Cage Exit Probability versus Excess Energy in the Photodissociation of Matrix-Isolated HCl. H. Gödderz, N. Schwentner, M. Chergui: J. Chem. Phys. 105, 451-458 (1996)
16. Ultrafast Intramolecular Dynamics of I₂ in CCl₄ from Resonance Raman Spectroscopy. Xu, N. Schwentner, S. Hennig, M. Chergui: J. Raman Spec. 28, 433-443 (1997)
17. Amplification and Surface Topography in SR-Induced Dry Etching of Si with XeF₂. Streller, B. Li, H.-P. Krause, N. Schwentner: J. Vac. Science, Techn. B 14, 91-95 (1996)
18. Quantum Control of Wave Packet Evolution with Tailored Femtosecond Pulses. Kohler, V.V. Yakovlev, J. Che, J.L. Krause, M. Mesina, K. Wilson, N. Schwentner, R.M. Whitnell and Y. Yan: Phys. Rev. Lett. 74, 3360-3363 (1995)
19. Absorption by Dissociative Continua and Rydberg states in Condensed Matter: HCl in Rare Gas Matrices. Gödderz, N. Schwentner, M. Chergui: Chem. Phys. 209, 91-100 (1996)
20. Spectroscopy of F₂ in Neon Matrices. Bressler, W. Lawrence and N. Schwentner J. Chem. Phys. 105, 1318-1329 (1996)

Prof. Dr. Dietmar Stehlik

FU Berlin

Arbeitsgebiet: Photophysik/chemie in molekularen Systemen und photoaktiven Proteinen, Magnetische Resonanz und optische Kurzzeitspektroskopie

Kurzbiographie:

Geboren 1939; Physikstudium in Heidelberg und München 1958-63, Promotion (Universität Heidelberg) bei Prof. K. H. Hausser 1966, Postdoc Univ. Cal. Berkeley 1967-69, wiss. Mitarbeiter MPIImF (Mol. Physik) Heidelberg 1969-76, Habilitation (Univ. Heidelberg) 1975, Professor FB Physik, Freie Universität Berlin seit 1976. Zahlreiche Gasttätigkeiten im Ausland.

Auszeichnungen, Sonderfunktionen:

Gastprofessur Univ. Leuven 1972; Gastprofessur Univ. Cal. Berkeley 1981/82; Dekan/Prodekan des FB Physik, FU Berlin 1982-84 u. 88-90; Sprecher des Sfb 337 (Energie- und Ladungstransfer in molekularen Aggregaten) 1986-98; Visiting Scientist Research School of Chem. Australian Nat. Univ. Canberra 1985/86 u. 1988; Fellow Inst. for Advanced Studies Hebrew Univ. Jerusalem 1990/91; Visiting Scientist Molecular Biodynamics Lab Univ. Cal. Berkeley 1993/94; Bewilligungsausschuss der DFG für GK 1993-99; Gastprofessur Univ. Capetown, RSA 1996/97; Visiting Scientist Stanford University 2000/01. Mehrfach Mitglied in zentralen FU Kommissionen und im Editorial Board internationaler Journals.

Kooperationen:

Argonne National Laboratory (M. Thurnauer, M. Wasielewski); Univ. Cal. Berkeley (E. L. Hahn, M. Klein, A. Pines, K. Sauer); Univ. Leiden (A. Hoff, J. Schmidt); Australian Nat. Univ. (R. Bramley, R. Pace); Russian Academy of Sciences, Kazan (K. Salikhov); Russian Academy of Sciences, Moskau (L. Trakhtenberg); Hebrew University, Jerusalem (H. Levanon); Penn State Univ. (J. Golbeck, D. Bryant); Iowa State Univ. (P. Chitnis, W. Struwe); Univ. Florence (I. Bertini, C. Luchinat); Section de Bioenergétique CNRS Saclay (K. Brettel, P. Sétif, W. Rutherford); Brandeis University (I. Y. Chan, H. Linschitz); TU Berlin, Max-Volmer-Institut (P. Fromme, H. Witt, E. Schlodder, W. Lubitz, R. Bittl) u. a.

Forschungsschwerpunkte:

- Photoprozesse in Reaktionszentren der Photosynthese und in Modellsystemen: Aufklärung der Mechanismen und Struktur/Funktionsbeziehungen von Energie- und Ladungstransferprozessen mithilfe zeitauflösender Multifrequenz EPR- und optischer Kurzzeit-Spektroskopie (1.-5., 7., 8., 12.).
- Festkörper-Photoreaktionen: Tunnelmechanismus, Druck- und Temperaturabhängigkeit, H/D Isotopeneffekt in Photoreaktionen mit intermolekularem H-Atomtransfer in geordneter Matrix (6.,9.)
- Paramagnetische NMR: zur Strukturbestimmung von FeS Proteinuntereinheiten von Photosystemen (11.).
- Spinpolarisationsprozesse und Spindynamik in Photoprozessen mit transienten Mehrspinsystemen: Entwicklung von theoretischen Modellen und Simulationsroutinen zur detaillierten Beschreibung der experimentellen Beobachtungen (10.).
- Optische Ultrakurzzeitspektroskopie von Elementarprozessen in photoaktiven Proteinen: Aufklärung von Primärprozessen im Femto- und Picosekundenbereich, u.a. mit gezielt modifizierten Kofaktor/Protein-Systemen (13.).

(Die Zahlen in Klammern beziehen sich auf die ausgewählten Publikationen)

Ausgewählte Publikationen:

1. A. van der Est, T. Prisner, R. Bittl, P. Fromme, W. Lubitz, K. Möbius, D. Stehlik: *Time Resolved X-, K- and W-band EPR of the Radical Pair State $P_{700}^+A_1^-$ of Photosystem I in Comparison with $P_{865}^+ Q_A^-$ in Bacterial Reaction Centers*, J. Phys. Chem. B 101 No. 8, 1437-1443 (1997)
A. Kamlowski, A. van der Est, P. Fromme, D. Stehlik: *Low Temperature EPR on Photosystem I Single Crystals: Orientation of the Iron-Sulfur Centers F_A and F_B* , Biochimica et Biophysica Acta 1319, 185-198 (1997)
A. Kamlowski, A. van der Est, P. Fromme, N. Krauß, W.-D. Schubert, O. Klukas, D. Stehlik: *The Structural Organization of the PsaC Protein in Photosystem I from Single Crystal EPR and X-Ray Crystallographic Studies*, Biochimica et Biophysica Acta 1319, 199-213 (1997)
2. D. Stehlik, K. Möbius: *New EPR Methods for Investigating Photoprocesses with Paramagnetic Intermediates*, Annu. Rev. Phys. Chem. 48, 745-784 (1997)
A. van der Est, G. Fuchsle, D. Stehlik, M.R. Wasielewski: *Separation of the Exchange and Dipolar Contributions to the Spin-Spin Coupling in the Donor-Acceptor Complex TAPD-ZnP-NQ*, Appl. Magn. Reson. 13, 317-335 (1997)
B. Prass, D. Stehlik, I. Y. Chan, L. I. Trakhtenberg, V. L. Klochikhin: *Vibration-Assisted Intermolecular Hydrogen Tunneling in Photoreactive Doped Molecular Crystals: Effect of Temperature and Pressure*, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 102, 498-503 (1998)

- A. Kamlowski, S. G. Zech, P. Fromme, R. Bittl, W. Lubitz, H. T. Witt, D. Stehlik: *The Radical Pair State $P_{700}^+ A_1^-$ in Photosystem I Single Crystals: Orientation Dependence of the Transient Spin-Polarized EPR Spectra*, J. Phys. Chem. B 102, 8266-8277 (1998)
3. A. Kamlowski, B. Altenberg-Greulich, A. van der Est, S. G. Zech, R. Bittl, P. Fromme, W. Lubitz, D. Stehlik: *The Quinone Acceptor A_1 in Photosystem I: Binding Site, and Comparison to Q_A in Purple Bacteria Reaction Centers*, J. Phys. Chem. B 102, 8278-8287 (1998)
4. Y. Chan, A. J. Hallock, B. Prass, D. Stehlik: *Deuterium Effect on the Pressure Coefficient of the Tunneling Rate in the Acridine-Fluorene Solid-State Photoreactive System*, J. Phys. Chem. A 103, 344-348 (1999)
5. K. Salikhov, A. van der Est, D. Stehlik: *Transient EPR Spectra and Spin Dynamics of Coupled Three Spin Systems in Photosynthetic Reaction Centers*, Appl. Magn. Res. 16, 101-134 (1999)
6. M. L. Antonkine, D. Bentreop, I. Bertini, C. Luchinat, G. Shen, D. A. Bryant, D. Stehlik, J. Golbeck: *Paramagnetic $1H$ NMR spectroscopy of the reduced, unbound Photosystem I subunit PsaC: sequence specific assignment of contact-shifted resonances and identification of mixed and equal valence Fe-Fe pairs in $[4Fe-4S]$ centers F^A and F^B* , J. Biol. Inorgan. Chem. 5, 381-392 (2000)
7. B. Zybailov, A. van der Est, S. G. Zech, C. Teutloff, T. Wade Johnson, G. Shen, R. Bittl, D. Stehlik, P. R. Chitnis, J. Golbeck: *Recruitment of a Foreign Quinone into the A_1 Site of Photosystem I, II. Structural and Functional Characterization of Phylloquinone Biosynthetic Pathway Mutants by EPR and ENDOR Spectroscopy*, J. Biol. Chem. 275, 8531-8539 (2000)
8. M. Byrdin, I. Rimke, E. Schlodder, D. Stehlik, T. A. Roelofs: *Decay Kinetics and Quantum Yields of Fluorescence in Photosystem I from Synechococcus elongatus with P_{700} in the reduced and oxidized State: Are the Kinetic of Excited State Decay Trap-limited or Transfer-limited?*, Biophys. J. 79, 992-1007 (2000)

Dr. Štefan Vajda

Profil

Akademische Abschlüsse

- 6/1985 Diplom in Physikalischer Chemie an der Karls Universität Prag,
Prag, Tschechoslowakei
- 6/1990 C.Sc. (Dr. rer.nat. in Chemie) an der Karls Universität Prag

Verlauf des Hochschulstudiums

- 9/1980 - 6/1985 Grundstudium der Chemie an der Karls Universität Prag,
Hauptfach: Physikalische Chemie
- 9/1985 - 11/1989 Doktorand an der Karls Universität Prag
(zwischenzeitlich ein Jahr Militärdienst)

Wissenschaftliche Tätigkeiten nach dem Studium

- 12/1989 - 9/1991 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Karls Universität Prag,
Naturwissenschaftliche Fakultät
- 10/1991 - 7/1992 Postdoktorand an der University of Chicago, Institut für Chemie, Chicago,
U.S.A.
- 8/1992 - 9/1994 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Karls Universität Prag,
Naturwissenschaftliche Fakultät
- 10/1994 - 9/1995 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Karls Universität Prag,
Mathematisch-Physikalische Fakultät
(Arbeiten auf dem Gebiet der zeitaufgelöste Laserspektroskopie.)
- 10/1995 – 9/2000 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Freie Universität Berlin,
- 10/2000 - 9/003 Wissenschaftlicher Assistent (C1) an der Freie Universität Berlin, Berlin

Gasttätigkeiten und Auslandsaufenthalte

- 10/1990 Gastwissenschaftler an der Universität Göttingen,
- 10/1991 - 7/1992 Postdoc an der University of Chicago, U.S.A.
- 8/1994 - 9/1994 Gastwissenschaftler am Institut für Experimentalphysik,
und
1/1995 - 9/1995 Freie Universität Berlin

Auszeichnungen

Ausgewählte Publikationen

„Nanosecond Fluorometry of the Single Tryptophan in Cytochrome 450_e (P450 II B2)“

P. Anzenbacher, J. Hudecek, Š. Vajda, and V. Fidler
Biochem. Biophys. Res. Commun. **162**, 921-925 (1989)

„Study of Polymer Chain Dynamics in Solution by Time-Resolved Spectrofluorometry“

V. Fidler, Š. Vajda, Z. Limpouchová, K. Procházka, and B. Bednár
Coll. Czech. Chem. Commun. **54**, 3011-3024 (1989)

„Time-Resolved Fluorescence Study of Micellizing Block Copolymers“

K. Procházka, Š. Vajda, V. Fidler, B. Bednár, E. Mukhtar, M. Almgren, and A.S. Holmes
J. Mol. Struct. **219**, 377-382 (1990)

„Time-Resolved Fluorescence Study of Chain Dynamics. I. Poly(Methacrylic Acid) in Dilute Water Solutions“

B. Bednár, Š. Vajda, V. Fidler, J. Trnená, P. Svoboda, and K. Procházka
Macromolecules **24**, 2054-2059 (1991)

„Nanosecond Fluorescence of Tryptophans in Cytochrome P450_{SCC} (CYP 11 A1): Effect of Substrate Binding“

P. Anzenbacher, J. Hudecek, Š. Vajda, V. Fidler, C. Laroque, and R. Lange
Biochem. Biophys. Res. Commun. **181**, 1493-1499 (1991)

„Femtosecond through Nanosecond Time Scale Solvation Dynamics in Pure Water and Inside the γ -Cyclodextrin Cavity“

Š. Vajda, R. Jimenez, E.W. Castner, Jr., S.J. Rosenthal, V. Fidler, and G.R. Fleming
J. Chem. Soc. Faraday Transactions **91**, 867-873 (1995)

„Picosecond Tryptophan Fluorescence of Human Blood Serum Orosomuroid“

M. Hof, Š. Vajda, V. Fidler, and V. Karpenko
Collect. Czech. Chem. Commun. **61**, 808-818 (1996)

„Spectroscopy of Mass-Selected Neutral Clusters: Femtosecond Dynamics of Ag_n“

T. Leisner, S. Rutz, G. Sommerer, Š. Vajda, S. Wolf, E. Schreiber, and L. Wöste
„Fast Elementary Processes in Chemical and Biological Systems“,
AIP Conference Proceedings Vol. 364 (AIP Press, Woodbury, New York, 1996) p.
603 - 609

„Angular Dependences of Third Harmonic Generation from Microdroplets“

J. Kasparian, B. Krämer, J.P. Dewitz, Š. Vajda, P. Rairoux, B. Vezin, V. Boutou,

T. Leisner, W. Hübner, J.P. Wolf, L. Wöste, and K.H. Bennemann,
Phys. Rev. Lett. **78**, 2952 (1997)

„Size Dependent Ultrafast Relaxation Phenomena in Metal Clusters“

R.S. Berry, V. Bonacic-Koutecký, J. Gauss, T. Leisner, J. Manz, B. Reischl-Lenz,
H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber, Š. Vajda, R. de Vivie-Riedle, S. Wolf, and L.
Wöste

*Adv. Chem. Phys., Volume 101: Chemical Reactions and their Control on the
Femtosecond Time-Scale, XXth Solvay Conference on Chemistry*, Edited by P.
Gaspard, I. Burghardt, I. Prigogine and S. A. Rice, John Wiley & Sons 1997

„Reactions of Size-Selected Positively Charged Nickel Clusters with Carbon
Monoxide in Molecular Beams“

Š. Vajda, S. Wolf, T. Leisner, U. Busolt, L. Wöste, and D. J. Wales
J. Chem. Phys. **107**, 3492 (1997)

„Observation of Predissociated Excited States in Mixed Alkali Trimer Clusters
Na₂K and K₂Na: Time-Resolved Spectroscopy of Bound-Free Transitions“

Š. Vajda, S. Rutz, J. Heufelder, P. Rosendo, H. Ruppe, P. Wetzel, and L. Wöste
Femtochemistry issue of J. Phys. Chem. A **102**, 4066 (1998)

„Time-Resolved Observation of Geometrical Reorientations of Metal Clusters“

Š. Vajda, S. Wolf, U. Busolt, H. Hess, T. Leisner, and L. Wöste

in: *Ultrafast Phenomena XI* Eds.: T. Elsaesser, J.G. Fujimoto, D.A. Wiersma, W.
Zinth, Chem. Phys. 63, pp. 482-484 (1998)

„The Relaxation from Linear to Triangular Ag₃ Probed by Femtosecond Resonant
Two-Photon Ionization“

T. Leisner, Š. Vajda, S. Wolf, L. Wöste, and R.S. Berry
J. Chem. Phys. **111**, 1017 (1999)

„Reactions of Size-Selected Metal Cluster Ions“

Š. Vajda, T. Leisner, S. Wolf, L. Wöste,
Philosophical Magazin B **79**, 1353 (1999)

„Ultrafast Fragmentation and Vibrational Dynamics of Triatomic Hetero- and
Homonuclear Alkali Metal Clusters“

P. Rosendo-Francisco, C. Lupulescu, B. Baptist, and Š. Vajda
Journal of the Chinese Chemical Society, (2000), accepted

„Feedback Optimization of Shaped Femtosecond Laser Pulses for Controlling the
Wavepacket Dynamics and Reactivity of Mixed Alkaline Clusters“

Š. Vajda, A. Bartelt, E.C. Kaposta, T. Leisner, C. Lupulescu, S. Minemoto, P.
Rosendo-Francisco, and L. Wöste
(2000), submitted

Prof. Dr. Frank Willig
Hahn-Meitner-Institut

Arbeitsgebiete:

Dynamik von Grenzflächenreaktionen, Zeitaufgelöste Spektroskopie, Präparation und Charakterisierung von Grenzflächen und Oberflächen von Halbleitern

Kurzbiographie:

Geboren 1940 in Dessau, High School, USA, Gymnasium, Deutschland. Studium der Medizin und Physik an der Univ. Frankfurt, Univ. Hamburg, TU München, 1968 Diplom in Physik, 1970 Promotion an der TU München bei Prof. H. Gerischer, wiss. Assistent TU München, Habilitation an der TU Berlin 1976, Arbeitsgruppenleiter am Fritz-Haber-Institut 1971-1995 bei Prof. H. Gerischer und Prof. G. Ertl, seit 1995 Leitender Wissenschaftler am Hahn-Meitner-Institut, Abteilungsleiter: Dynamik von Grenzflächenreaktionen.

Auszeichnungen, Sonderfunktionen:

Gastprofessor am Institut for Molecular Science, Japan, an der Univ. PeM Curie, Paris. Chairman der IPS-12 und Mitglied im IC der IPS. Gutachter des DOE.

Kooperationen:

Prof. Pileni, Univ. Paris; Prof. Holloway, Univ. Liverpool; Prof. Hicks, Univ. Cal., LA; Prof. Luther, ISE, Freiburg; Prof. Umapathy, IIS, Bangalore

Forschungsschwerpunkte:

- 1) Untersuchung der Dynamik von Grenzflächenreaktionen mit zeitaufgelöster Spektroskopie und zeitaufgelösten Photoströmen (BZR99-SMW)
- 2) MOCVD-Präparation und Charakterisierung von Grenzflächen von III-V Halbleitern (HVK99-HTV)

Ausgewählte Publikationen

/BZR99/ B. Burfeindt, C. Zimmermann, S. Ramakrishna, T. Hannappel, B. Meißner, W. Storck, and F. Willig
Femtosecond electron transfer from the excited state of chemically anchored chromophores into the empty conduction band of nano-crystalline sponge-like TiO₂ films
Z. physikal. Chemie, **212**, 1999, 67-75

- /RW00/ S. Ramakrishna and F. Willig
 Pump-probe spectroscopy of ultrafast electron injection from the excited state of an anchored chromophore to a semiconductor surface in UHV: A theoretical model
 J. Phys. Chem. **B**, **104**, 2000, 68-77
- /ZWR00/ C. Zimmermann, F. Willig, S. Ramakrishna, B. Pettinger, B. Burfeindt, N. Biswas, R. Eichberger
 Unique curve crossing and vibrational wavepacket behavior of femtosecond heterogeneous electron transfer,
 in Ultrafast Phenomena XII, eds. T. Elsaesser, J.G. Fujimoto, D.A. Wiersma, W. Zinth, 2000
- /WZR00/ F. Willig, C. Zimmermann, S. Ramakrishna, W. Storck
 Ultrafast dynamics of light-induced electron injection from a molecular donor into the wide conduction band of a semiconductor as acceptor
 Electrochimica Acta (2000) im Druck
- /RMW/ S. Ramakrishna, V. May, and F. Willig
 Franck-Condon dictated generation of an electronic wavepacket eingereicht
- /SW99/ K. Schwarzburg and F. Willig
 Origin of Photovoltage and Photocurrent in the Nanoporous Dye-sensitized Electrochemical Solar Cell
 J. Phys. Chem. **B** **103**, 1999, 5743-5746
- /SMW/ K. Schwarzburg, B. Meißner, and F. Willig
 Final charge separation in the electrochemical sponge type dye-TiO₂ solar cell probed by photocurrent transients
 in Vorbereitung
- /HVK99/ T. Hannappel, S. Visbeck, K. Knorr, J. Mahrt, M. Zorn, and F. Willig
 Preparation of P-rich InP-surfaces via MOCVD and surface characterization in UHV
 Appl. Phys. **A** **69**, 1999, 427-431
- /WH99/ F. Willig und T. Hannappel
 Vorrichtung und Verfahren zum Überführen einer Probe aus einem Reaktorgefäß in ein Ultrahochvakuum
 Patentschrift DE 19837851 C1, 1999
- /HVZ/ T. Hannappel, S. Visbeck, M. Zorn, J.-T. Zettler, F. Willig
 Reflectance Anisotropy Spectra for the Transition from the P-rich to the In-rich Surface Reconstruction of InP(100)
 J. Cryst. Growth, angenommen
- /HTV/ T. Hannappel, L. Töben, S. Visbeck, H.-J. Crawack, C. Pettenkofer, F. Willig
 UPS and 20 K RAS of the P-rich and In-rich surfaces of InP(100)
 Surface Science Lett., eingereicht

Prof. Dr. Ludger Wöste

Freie Universität Berlin

**Arbeitsgebiet: Femtosekunden-Spektroskopie, Clusterforschung, Aerosolphysik,
Optische Fernerkundung der Atmosphäre**

Kurzbiografie:

Geboren 1946, Physikstudium 1965-1972 an den Universitäten Aachen, Bonn, Köln, Diplomarbeit bei Professor H. Walther, 1973-1978 Promotion bei Prof. Schumacher an der Universität Bern, 1978-1980 Postdoc bei Professor R. N. Zare an der Stanford University, 1980-1987 Projektleiter und Lehrbeauftragter an der ETH Lausanne, 1984 Gastprofessor am Laboratoire Aimé Cotton, Orsay, 1987-1989 Direktor des Laserzentrums der ETH Lausanne, seit 1989 C4-Professor am Fachbereich Physik der Freien Universität Berlin, seit 1998 Sprecher des SFB 450.

Mitgliedschaften und Ehrungen:

seit 1989: Deutsche Physikalische Gesellschaft
seit 1995: Leibnitz Sozietät
1994: Innovationspreis des Landes Berlin-Brandenburg
1999: Warburg-Smoluchowski-Preis der Deutschen Physikalischen Gesellschaft
und der Polnischen Physikalischen Gesellschaft

Kooperationen:

Professor H. Rabitz, Princeton; Professor R. S. Berry, Chicago; Dr. Th. Feurer, Jena; Dr. W. Fuß, Garching; Professor M. Broyer, Lyon; Dr. U. Heiz, Lausanne; Professor B. Girard, Toulouse; Professor J. P. Wolf, Lyon; Professor Th. Leisner, Ilmenau; Professor A. Mysyrowicz, Palaiseau; Professor C. Brèchignac, Orsay; Professor Chr. Ernst, Warschau; Professor T. Kondow, Tokyo.

Ausgewählte Publikationen:

Spectroscopy on Size-Selected Neutral Silver Clusters: Femtosecond Evolution of Neutral Silver Trimers.

S. Wolf, G. Sommerer, S. Rutz, E. Schreiber, T. Leisner, L. Wöste,
Physical Review Letters 74 (1995) 4177-4180.

Ultrafast Photodissociation of $K_n=3...9$ Clusters.

A. Ruff, S. Rutz, E. Schreiber, L. Wöste,
Z. Phys. D. 37 (1996) 175-180.

Pulse Width Controlled Molecular Dynamics: Symmetric Stretch Versus Pseudorotations in $Na_3(B)$.

R. de Vivie-Riedle, J. Gaus, V. Bonacic-Koutecky, J. Manz, B. Reischl, S. Rutz, E. Schreiber, L. Wöste,
Femtochemistry, Lausanne Sept. 4-8, 1995, Editor Majed Chergui (World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong-Kong) 1996, 319-325.

Femtosecond Wave Packet Propagation Dynamics in the Dissociative K_3 Molecule.

H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber, L. Wöste,
Chem. Phys. Lett. 257 (1996) 356-364.

Femtosecond Wave Packet Propagation in Spin-Orbit Coupled Electronic States of the Na_2 Molecule.

S. Rutz, S. Greschik, E. Schreiber, L. Wöste,
Chem. Phys. Lett. 257 (1996) 365-373.

Laser Spectroscopy of Metal Clusters.

L. Wöste,
Z. Phys. Chem. 196 (1996) 1-412.

Size-Dependent Ultrafast Relaxation Phenomena in Metal Clusters.

R.S. Berry, V. Bonacic-Koutecky, J. Gaus, T. Leisner, J. Manz, B. Reischl-Lenz, H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber, S. Vajda, R. de Vivie-Riedle, S. Wolf, L. Wöste,
Chem. Phys. 101 (1997) 101-139.

Reactions of Size-Selected Positively Charged Nickel Clusters with Carbon Monoxide in Molecular Beams.

S. Vajda, S. Wolf, T. Leisner, U. Busolt, D.J. Wales, L. Wöste,
J. Chem. Phys. 107 (9) (1997) 3492-3497.

Femtosecond Wave Packet Dynamics in Alkali Trimers.

S. Rutz, H. Ruppe, E. Schreiber, L. Wöste,
Z. Phys. D 40 (1997) 25-29.

Angular Dependences of Third Harmonic Generation from Microdroplets.

J. Kasparian, B. Krämer, J.P. Dewitz, S. Vajda, P. Rairoux, B. Vezin, V. Boutou, T. Leisner, W. Hübner, J.P. Wolf, L. Wöste and K.H. Bennemann,
Phys. Rev. Lett. 78 (1997) 2952-2955.

Temporal Coherent Control Induced by Wave Packet Interferences in One and Two Photon Atomic Transitions.

M.A. Bouchene, V. Blanchet, C. Nicole, N. Melikechi, B. Girard, H. Ruppe, S. Rutz, E. Schreiber, L. Wöste,
Eur. Phys. J. D2 (1998) 131-141.

Observation of Predissociated Excited States in Mixed Alkali Trimer Clusters Na_2K and K_2Na ; Time-Resolved Spectroscopy of Bound-Free Transitions.

S. Vajda, S. Rutz, J. Heufelder, P. Rosendo, H. Ruppe, P. Wetzel, L. Wöste,
J. Phys. Chem. A 102 (1998) 4066-4068.

The relaxation from linear to triangular Ag_3 probed by femtosecond two-photon ionization.

T. Leisner, S. Vajda, S. Wolf, L. Wöste and R.S. Berry,
J. Chem. Phys. 111 (1999) 1017-1021.

Cluster-surface interaction studied by time-resolved two-photon photoemission.

U. Busolt, E. Cottancin, H. Röhr, L. Socaciu, T. Leisner, L. Wöste,
Appl. Phys. B 68 (1999) 453-457.

Reactions of size-selected metal cluster ions.

S. Vajda, T. Leisner, S. Wolf, L. Wöste,
Philosophical Magazin B, 79 (1999) 1353-1366.

Prof. Dr. Martin Wolf

FU Berlin

Arbeitsgebiet: Oberflächenphysik, Ultrakurzzeitdynamik an Grenzflächen

Kurzbiographie:

Geboren 1961, Physikstudium 1980 – 88 an der FU Berlin, Doktorarbeit am Fritz-Haber-Institut der MPG bei Prof. G. Ertl zum Thema "Untersuchungen zur Dynamik photoinduzierter Oberflächenreaktionen", Promotion 1991, Postdoc 1991-92 an der University of Texas at Austin bei Prof. M. White, 1992 – 99 wiss. Mitarbeiter am Fritz-Haber-Institut mit Arbeiten zur Femtosekundenspektroskopie elektronischer Anregungen und Reaktionen an Festkörperoberflächen, 1993 Forschungsaufenthalt bei IBM Yorktown Heights bei Prof. T.F. Heinz, Habilitation 1998 an der FU Berlin, seit 2000 Professor am FB Physik, Aufbau einer Arbeitsgruppe zur Ultrakurzzeitdynamik an Grenzflächen mit den Forschungsschwerpunkten Elektronendynamik, Optik an Grenzflächen, Schwingungsdynamik und Femtochemie an Oberflächen.

Auszeichnungen, Sonderfunktionen:

Feodor-Lynen-Stipendium der Alexander-von-Humboldt Stiftung 1991, Carl-Ramsauer-Preis der AEG 1991, Reimar-Lüst-Stipendium der MPG 1992, Karl-Scheel-Preis der DPG Berlin 1998, Heisenberg-Stipendium der DFG 1999, Organisation der internationaler Workshops "Ultrafast Surface Dynamics" 1997 und 1999, FHI Ferienschule 1999.

Kooperationen:

Columbia University (Prof. T.F. Heinz), University of California, Riverside (Prof. L. Bartels), FU Berlin (Prof. K.H. Rieder), University of Cambridge (Prof. D. King), Universität Essen (Prof. E. Hasselbrink), University of Leiden (Prof. A. Kleyn, Dr. M. Bonn), University of Minnesota (Prof. X.Y. Zhu), University Paris Sud (Prof. J.P. Gauyacq), Universität Regensburg (Prof. P. Saalfrank), University of San Sebastian (Prof. P. Echenique).

Forschungsschwerpunkte:

Die Forschungsprojekte zielen auf ein direktes, mikroskopisches Verständnis der zeitlichen Abläufe von Elementarprozessen im Volumen und an Grenzflächen von Festkörpern. Zur Untersuchung dieser Prozesse werden zeitaufgelöste Methoden der nicht-linearen Optik und Femtosekunden-Laserspektroskopie eingesetzt, kombiniert mit Probenpräparation im Ultra-Hoch-Vakuum. Forschungsschwerpunkte sind:

- Femtosekundendynamik optisch angeregter Elektronen an Metalloberflächen, metallisch dünnen Filmen und molekularen Adsorbatschichten an Oberflächen untersucht mit zeitaufgelöster Zwei-Photonen-Photoemission.
- Zeitaufgelöste lineare und nicht-lineare Optik zur Analyse elektronischer und magnetischer Eigenschaften von Festkörpergrenzflächen, insbesondere der Kopplung zwischen Elektron und Phononen, Transportprozessen und Magnetisierungsdynamik.
- Femtochemie an Oberflächen und Reaktionskontrolle mittels intensiver Femtosekunden-Laserpulse an kleinen Molekülen adsorbiert auf Einkristallobereflächen und metallischen Nanoteilchen.
- Schwingungsdynamik und zeitaufgelöste Infrarot-Spektroskopie adsorbierter Moleküle und transienter Reaktionsprodukte an Grenzflächen.

Ausgewählte Publikationen:

- /BMR98/ L. Bartels, G. Meyer, H. Rieder, D. Velic, E. Knoesel, A. Hotzel, M. Wolf and G. Ertl
“Dynamics of electron-induced manipulation of individual CO molecules on Cu(111)”,
 Phys. Rev. Lett. **80**, 2004 (1998).
- /BFH99/ M. Bonn, S. Funk, Ch. Hess, D. Denzler, C. Stampfl, M. Scheffler, M. Wolf and G. Ertl
“Phonon versus electron mediated desorption and oxidation of CO on Ru(001)”,
 Science **285**, 1042 (1999).
- /BHF00/ M. Bonn, Ch. Hess, S. Funk, J. Miners, B. N. J. Persson, M. Wolf and G. Ertl
“Femtosecond Surface Vibrational Spectroscopy of CO on Ru(001) during Desorption”
 Phys. Rev. Lett. **84**, 4653 (2000).
- /BDF00/ M. Bonn, D. Denzler, S. Funk, M. Wolf, S. Wellershoff and J. Hohlfeld
“Ultrafast electron dynamics at metal surfaces: Competition between electron-phonon coupling and hot electron transport”, Phys. Rev. B **61**, 1101 (2000).
- /HKW96/ T. Hertel, E. Knoesel, M. Wolf and G. Ertl
“Ultrafast electron dynamics at Cu(111): Response of an electron gas to optical excitation”, Phys. Rev. Lett. **76**, 535 (1996).
- /HWE95/ T. Hertel, M. Wolf and G. Ertl
“UV-Photostimulated desorption of ammonia from Cu(111)”
 J. Chem. Phys. **102**, 3414 (1995).

- /HBF00/ Ch. Hess, M. Bonn, S. Funk and M. Wolf
 “Hot-band excitation of CO chemisorbed on Ru(001) studied with broadband-IR sum-frequency generation”, Chem. Phys. Lett. **325**, 139 (2000).
- /HMI99/ A. Hotzel, G. Moos, K. Ishioka, M. Wolf, and G. Ertl
 “Femtosecond electron dynamics at adsorbate metal interfaces and the dielectric continuum model”, Appl. Phys. B **68**, 615 (1999).
- /KHW95/ E. Knoesel, T. Hertel, M. Wolf and G. Ertl
 “Femtosecond dynamics of electronic excitations of adsorbates studied with two-photon photoemission”, Chem. Phys. Lett. **240**, 409 (1995).
- /KHW98/ E. Knoesel, A. Hotzel and M. Wolf
 “Ultrafast dynamics of hot electrons and holes in copper: excitation, energy relaxation and transport effects”, Phys. Rev. B **57**, 12812 (1998).
- /WKH96/ M. Wolf, E. Knoesel and T. Hertel
 ”Ultrafast dynamics of electrons in image potential states on clean and Xe covered Cu(111)”, Phys. Rev. B **54**, R5295 (1996).
- /Wol97/ M. Wolf , “Femtosecond dynamics of electronic excitations at metal surfaces”, Surf. Sci. **377 - 379**, 343 (1997).
- /WoE00/ M. Wolf and G.Ertl, “Electron dynamics at surfaces”
 Science **288**, 1352 (2000).

Prof. Dr. Roland Zimmermann

Arbeitsgebiet: Theoretische Physik, Theorie dimensionsreduzierter Halbleitersysteme

Kurzbiographie

1942 in Olbernhau (Deutschland) geboren; 1949 bis 1961 Schulbesuch; 1962 bis 1967: Studium der Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin; 1967 bis 1991 wissenschaftlicher Mitarbeiter am Zentralinstitut für Elektronenphysik der Akademie der Wissenschaften der DDR in Berlin; dort 1972 Promotion zum Thema *Beiträge zur Exzitonentheorie*; seit 1987 Leiter der Arbeitsgruppe *Festkörpertheorie*; 1987 Habilitation Physik zum Thema *Vielteilchentheorie hochangeregter Halbleiter*; 1991/92 Vertretungsprofessur für Theoretische Physik in Dortmund; 1992 bis 1996 Leiter der Max-Planck-Arbeitsgruppe *Theorie dimensionsreduzierter Halbleitersysteme*; seit 1993 ordentlicher Professor für Theoretische Physik an der Humboldt Universität zu Berlin, Lehrstuhl für Halbleiterttheorie

Kooperationen außerhalb des Sfb

Prof. V. Sundström (Lund), Prof. E. G. Petrov (Kiew), Prof. M. Schreiber (Chemnitz),

Forschungsschwerpunkte

- Grundlagen der dissipativen Quantendynamik
- Kontrolle molekularer Dynamik durch äußere Felder
- Elektronentransfer in Donator-Akzeptorsystemen und Proteinen
- Proton- und Zweiproton-Dynamik in molekularen Systemen
- Exzitonendynamik in Farbstoff-Komplexen und photosynthetischen Antennensystemen

Wichtige Veröffentlichungen der letzten 5 Jahre

D. Malzahn and V. May: *Floquet-Analysis of Vibrational State Preparation in an Open Molecular System*, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **29**, 2739 (1996).

Th. Renger and V. May: *Multiple Exciton Effects in Molecular Aggregates: Application to a Photosynthetic Antenna Complex*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3406 (1997).

I. A. Goychuk, E. G. Petrov, and V. May: *Control of Long-Range Electron Transfer in Dynamically Disorder Molecular Systems by an External Periodic Field*, J. Chem. Phys., **106**, 4522 (1997).

E. G. Petrov, I. S. Tolokh, and V. May: *Magnetic Field Control of Electron Motion in Molecular Nanostructures: Step-Like Behavior and Spin Polarization of a Bridge-Assisted Inter-Electrode Current*, Phys. Rev. Lett. **79**, 4006 (1997).

D. Schirrmeister and V. May: *Femtosecond Pulse Dependence of Dissipation in Molecular Systems*, Chem. Phys. Lett. **297**, 383 (1998).

Th. Renger and V. May: *Simulations of Frequency-Domain Spectra: Structure-Function Relationships in Photosynthetic Pigment-Protein Complexes*, Phys. Rev. Lett. **84**, 5228 (2000).

Th. Renger, V. May, and O. Kühn: *Ultrafast Excitation Energy Transfer Dynamics in Photosynthetic Pigment-Protein Complexes*, Phys. Rep., (in press).

Bücher:

G. Mahler, V. May, and M. Schreiber (eds.): *Molecular Electronics: Properties, Dynamics, and Applications*, Marcell Dekker, Inc., New York, 1996.

V. May and O. Kühn: *Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems A Theoretical Introduction*, Wiley-VCH, Weinheim, 1999.