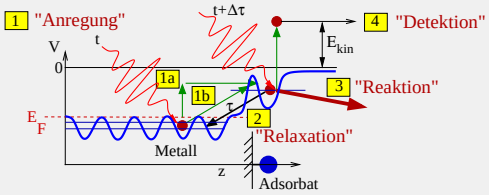
ÜBERSICHT

Ziele

Quantentheoretische Modellierung der
Kontrolle und zeitaufgelösten Spektroskopie
photochemischer Prozesse an Oberflächen

Generische Situation:

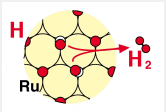


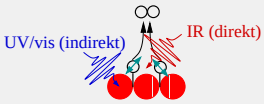
1a:	indirekte Anregung	$\longrightarrow$	inkohärente Kontrolle
1b:	direkte Anregung	$\longrightarrow$	direkte Kontrolle
2:	Relaxation		
3:	Reaktion	$\longrightarrow$	Ziel der Kontrolle
4:	Detektion	$\longrightarrow$	Analyse

Systeme / Prozesse

UP 1: Kontrolle der Kerndynamik von Adsorbaten nach indirekter UV-/vis-Laseranregung durch IR-Schwingungspräparation

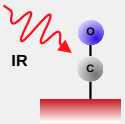
UP 1A: Kontrolle der assoziativen Photodesorption von H_2/Ru(0001) und Isotopomeren



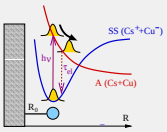


UP 1B: Multidimensionale IR-Anregung: CO/Cu(100)

Selektive IR-Anregung in hochdimensionalen, dissipativen Systemen

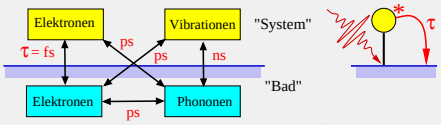


UP 2: Kontrolle und zeitaufgelöste Spektroskopie der Elektronen- und Kerndynamik am Beispiel des Systems Cs/Cu(111)



Methodische Herausforderungen

1. Dissipation: Energie und Phasenrelaxation



2. Quantendynamik

- Kerne
- Elektronen
- Gekoppelte Elektronen und Kerne
- Hochdimensionalität

3. Wechselwirkung Licht/Materie

- Direkte vs. indirekte Anregungsmechanismen
- Optimal Control Theory (OCT)

Bedarf

- **Doktorand 1, 2/3 BAT IIa(O):**
  Zur Durchführung quantenchemischer Rechnungen. Dazu gehören im UP1: Entwicklung von Potentialflächen, Durchführung von Clusterrechnungen, Bestimmung von Dipolflächen sowie die Entwicklung und Anwendung eines Computerprogramms zur Berechnung von Vibrationslebensdauern.

- **Doktorand 2, 2/3 BAT IIa(O):**
  Vornehmlich zur Durchführung der Quantendynamik. Dazu gehören Programmentwicklungen zur assoziativen Desorption, IR-Anregung von H/H/Metall und CO/Cu(100) sowie Modellrechnungen zu System Cs/Cu(111).

Kooperationen

- **TP A6 (Wolf / Frischkorn / Hotzel):** Intensive Kooperation zur assoziativen Desorption von Wasserstoff von Metalloberflächen, IR-Voranregung von Adsorbaten, Erzeugung von vibratorischen Wellenpaketen im System Metall/Cs.

- **TP C1 (Manz / Kühn / Gerber):** Modellierung einer Relaxationsdynamik durch mechanische Kopplung mit Hilfe von hochdimensionalen MCTDH-Rechnungen, sowie von Langevin-Verfahren.

- **TP C3 (May / Zimmermann), A3 (Schwentner / Dietrich), A7 (Eberhardt / Neeb):** Kontrolle von Molekularsystemen und Elektronendynamik; Methodenaustausch; Modellrechnungen zur Energiedissipation in Festkörpern; Modellrechnungen zur Desorption kleiner Moleküle.

- **Extern:** Othsuki, Sendai, Japan: Optimale Kontrolle;
  Meyer, Heidelberg, MCTDH.