UNTERPROJEKT 2

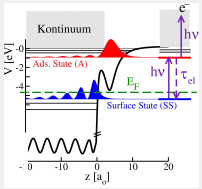
System / Problemstellung

Elektronen- und Kerndynamik am Beispiel des Systems Cs/Cu(111)

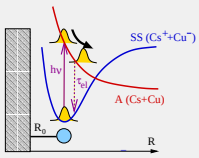
Ziele:

- Kontrolle / Optimierung der elektronischen Anregung[1]
- Kontrolle / Optimierung der Kerndynamik
- Detektion von Zwischenzuständen mittels zeitaufgelöster 2-Photonen-Photoemissionsspektroskopie (TR-2PPE)
- Erzeugung vibratorischer Wellenpakete[2] (siehe auch[3])

Elektronendynamik:



Kerndynamik:



Experimente :

- Direkte Anregung Surface State $\longrightarrow$ A [1]
- $\tau_{el} \approx 50$ fs
- 2-Puls-Korrelation: Cs-Bewegung in Echtzeit
- Cs/Pt(111): Vibratorische Wellenpakete [2]

[1] H. Petek, M.J. Weida, H. Nagano, S. Ogawa, Science **288**, 1402 (2000)
[2] K. Watanabe, N. Takagi, Y. Matsumoto, Chem. Phys. Lett. **366**, 606 (2002)
[3] A. Melnikov, I. Radu, U. Bovensiepen, O. Krupin, K. Starke, E. Matthias, M. Wolf, Phys. Rev. Lett. **91**, 227403 (2003)

Arbeitsplan / Methodik

1.) Potentialflächen:

- Zunächst Einelektronen-Pseudopotential nach Gauyacq et al.[4] bei festem Cs-Cu Abstand R_0
- Danach Erweiterung auf zweidimensionale Dynamik $V(z, R)$, bzw. vierdimensionale Dynamik $V(\underline{r}, R)$

2.) Elektronendynamik:

- Iterative bzw. optimale Kontrolle der Elektronendynamik mit dem Ziel der Population des Adsorbatzustandes
- Zunächst im Wellenpaket-Bild
- Danach im Dichtematrix-Formalismus offener Quantensysteme zur Modellierung von Energie- und Phasenrelaxation
- Simulation von zeitaufgelösten 2PPE-Spektren

3.) Kerndynamik:

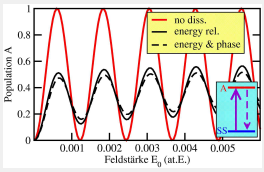
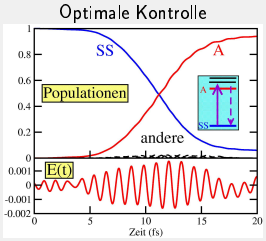
- Simulation der photostimulierten Desorption
- Optimierung der photostimulierten Desorption
- Erzeugung eines vibratorischen Wellenpaketes im (elektronischen) Grundzustand

[4] A.G. Borisov, A.K. Kazansky, J.P. Gauyacq, Phys. Rev. B **64**, 201105 (2001)

Vorarbeiten

- Entwicklung eines eindimensionalen Modells: $V(z; R_0)$
- Testrechnung zur Kontrolle der Elektronendynamik bei festgehaltenem Cs-Cu Abstand R_0:

Nicht-optimale Kontrolle



Optimale Kontrolle