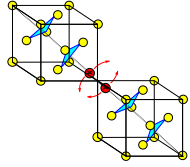


UP I: Orientierung von Molekülen in Edelgasmatrizen

Kooperation mit TP A3 (Schwertner/Dietrich, FU Physik, Berlin-Dahlem)
Kooperation mit TP C1 (Manz/Gerber, FU Chemie, Berlin-Dahlem)

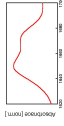
- Modell: $HX@Rg$, $X_2@Rg$
- schwache Kopplung: (Fast) freie Rotatoren
- mäßige Kopplung: für $J > 0$: Symmetriebrechung (dynamischer Jahn-Teller Eff.)
- starke Kopplung: Librationen statt Rotationen (statischer Jahn-Teller Eff.)



UP II: Konformationsdynamik von Polypeptiden

Kooperation mit TP B6 (P. Hamm, MBI, Berlin-Adlershof)

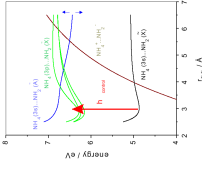
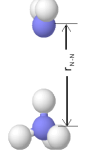
- System: TriAlanin in Wasser
- Infrarot-Spektrum
- Amide I mode: Dipol-Dipol-Kopplung der C=O Streckschwingungen (delokalisiert → exotonisch)
- Torsion des Rückgrats: Dieerwinkel ϕ, ψ bestimmt Winkel zwischen C=O Gruppen
- Sekundärstruktur: α -Helix vs. β -Faltblatt mit ps Zeitauflösung



Chemische Reaktionen in Molekülclustern

Kooperation mit TP A4 (Radloff/Schulz, MBI, Berlin-Adlershof)

- System: Ammoniak-Dimer und größere Cluster $(NH_3)_n$
- Kontrolle durch Infrarot-Puls
- Fragmentations-Kanäle:
 - $NH_3 \cdots NH_2$
 - $NH_2 \cdots NH_2$
 - $NH_2^+ \cdots NH_2^-$



UP I: Orientierung von Molekülen in Edelgasmatrizen

- Quanten-klassische Modellierung
 - Quanten-Subsystem: Rotation/Libration der Gastmoleküle
 - Klassisches Subsystem: Schwingungsmoden des Wirtskristalls
 - Potential: DIM (Diatomics in Molecule) mit empirischen oder ab initio Paarpotentials (⇌ TP C1)
 - Vergleich mit anderen Methoden: Semiklassisches "forward-backward", quantenmechanisches MCTDH (⇌ TP C1)
- Ziele
 - Kontrolle der Ausrichtung/Orientierung durch IR-Laserpulse in Konkurrenz mit matrix-induzierten/thermischen Effekten ???
 - Kontrolle der Reaktionsdynamik durch Ausrichtung/Orientierung ??? z. B. Photodissoziation und Folgereaktionen der Fragmente

UP II: Konformationsdynamik von Polypeptiden

- Quanten-klassische Modellierung
 - Quanten-Subsystem: C=O Streckschwingungen
 - Klassisches Subsystem: Torsion des Rückgrats und weitere Moden und/oder Solvent-Dynamik
 - Potential: Standard-Kraftfeld (elektr. Grundzustand) und ab initio Relation zwischen Torsion und Kopplung der C=O Gruppen
- Ziele
 - Relation zwischen Struktur and Spektroskopie
 - Relation zwischen Dynamik und Spektroskopie
 - Rolle des Solvents: Dissipation und Dephasierung
 - Möglichkeit der Kontrolle der Konformation !?

Chemische Reaktionen in Molekülclustern

- Quanten-klassische Modellierung von $(NH_3)_n$
 - Quanten-Subsystem: Wasserstoff-Transfer: $NH_3 \cdots NH_2$
 - Klassisches Subsystem: $(NH_3)_{n-2}$ als "Solvent"
 - Potential: ab initio Potentialeenergieflächen inkl. nichtadiabatische Kopplung (⇌ TPA4)
- Ziele
 - Kontrolle der Fragmentationsdynamik
 - Übergang zu größeren Clustern
 - ⇒ Kondensierte Materie