

Nichtlineare Licht-Materie-Dynamik in finiten Vielteilchensystemen: Atomare Cluster in intensiven IR-, VUV-, und XUV-Laserfeldern

Cluster und Nanopartikel erlauben die detaillierte Untersuchung von **Response- und Korrelationseffekten** in dichten Vielteilchensystemen bei extrem hoher Anregung. Das vorliegende Projekt widmet sich der **mikroskopischen Analyse** der durch Laseranregung getriebenen Elektronen- und Ionendynamik in Metall- und Edelgasclustern sowie der Untersuchung der **Entwicklung von Kopplungsmechanismen** als Funktion der Photonenenergie vom nah-infraroten (NIR) bis hin zum vakuum-ultravioletten Spektralbereich (VUV bis XUV). Hierbei steht insbesondere das Regime stark nichtlinearer Anregung im Mittelpunkt, für das eine störungstheoretische Behandlung der Licht-Materie-Wechselwirkung nicht mehr zulässig ist. An dieser Stelle kommt das Potenzial von Simulationsrechnungen, die explizite Zeitabhängigkeit der mikroskopischen Dynamik im Rahmen geeigneter Näherungen auch im nichtperturbativen Bereich beschreiben zu können, voll zum tragen. Für das vorliegende Projekt werden Methoden der **zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie** sowie **semiklassische Molekulardynamik** (Vlasov-TDDFT mit Stößen bzw. MD) eingesetzt. Zusätzlich werden nun auch elektromagnetische particle-in-cell Codes und Mean-Field-Monte-Carlo Simulationen verwendet, die im erst im Verlauf des Projektes neu entwickelt wurden. Im Fokus der Untersuchungen stehen die aus kollektiven und Mikrofeldeffekten resultierenden Einflüsse auf **Ionisations-, Heizungs- und Beschleunigungsprozesse**, deren Signaturen in den Fragmentspektren, sowie die gezielte Steuerung dieser Prozesse mit amplituden- und phasengeformten Pulsen. Weiterhin werden das Ionisationsverhalten und die Beiträge von Plasmaeffekten für die Clusteranregung mit intensiven VUV-Laserpulsen betrachtet, deren Verständnis wesentlich für neuartige Anwendungen mit freie-Elektronen-Lasern ist, wie der Einzelschuss-Strukturuntersuchung biologischer Moleküle. Die mit der hier beantragten Rechenzeit durchzuführenden Simulationen besitzen einen engen Bezug zu den Projekten A1, A5 und A8 des **DFG Sonderforschungsbereich 652 "Starke Korrelationen und kollektive Phänomene im Strahlungsfeld: Dichte Coulombsysteme, Cluster und Partikel"** (Rostock).