



Schlussbericht

Verbund: FSP 302 - Freie-Elektronen-Laser (Nichtlinear und zeitaufgelöst)

Zuwendungsempfänger: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel
 Projektleitung: Prof. Dr. habil. Michael Bonitz
 E-Mail: bonitz@physik.uni-kiel.de
 Förderkennzeichen: 05K13FKA
 Förderzeitraum: 01.07.2013 - 30.06.2016
 Zuwendung: 420.913,20 €
 Projektträger: Projektträger DESY

Zusätzlicher Kontakt: bauch@theo-physik.uni-kiel.de
 Zusätzlicher Name: Sebastian Bauch

Genutzte Großgeräte:	Labor	Gerät	Experiment
	Kondensierte Materie	Photonen	
Diplomarbeiten:	0		
Dissertationen:	0		
Habilitationen:	0		
Publikationen:	9		
Konferenzbeiträge:	17		
Patente:	0		
Bachelorarbeiten:	1		
Masterarbeiten:	2		

Dieser Bericht wurde beim Projektträger über einen individuellen Online-Zugang vom Projektleiter eingereicht und am 28.07.2016 09:44 für eine Veröffentlichung freigegeben.

Schlussbericht

“Zeitaufgelöste Photoionisation am FEL – nichtlineare Effekte, Korrelationen und Kohärenz in Atomen und Molekülen”

Zuwendungsempfänger: *Christian-Albrechts-Universität zu Kiel*

Projektleitung: *Prof. Dr. Michael Bonitz*¹

Zusammenfassung

Ziel dieses Projektes war die theoretische Beschreibung von Atomen und Molekülen, die mit kurzen, intensiven Laserpulsen angeregt werden, um Experimente, die im Verbundprojekt durchgeführt werden, zu beschreiben. Mit Hilfe genauer Vorhersagen sollten neue Erkenntnisse über physikalische Mechanismen gewonnen werden sowie das Anwendungspotential der neu entwickelten Röntgenlaser (FLASH, sFLASH, FLASH II, X-FEL) aufgezeigt werden.

Die bei Anregungen mit solcher Strahlung ablaufenden Prozesse finden auf der Femto- und Subfemto-Sekunden-Zeitskala statt und sind durch die Beteiligung mehrerer Elektronen äußerst komplex. Um solche Situationen theoretisch behandeln zu können, wurden in diesem Projekt Simulationspakete zur quantenmechanischen Beschreibung von Mehr-Elektronen-Systemen weiter- und neuentwickelt und erfolgreich angewendet. Dabei konnte auf umfangreiche Vorarbeiten aus der vorherigen Projektphase des Forschungsschwerpunktes (FSP-301) zurückgegriffen werden.

Im Fokus standen (i) die *zeitabhängige* Untersuchung der Elektronendynamik in Atomen und Molekülen unter Berücksichtigung der elektronischen Korrelationen, und (ii) die Demonstration neuartiger Spektroskopieverfahren im ultravioletten Spektralbereich mit Hilfe einer interferometrischen Zwei-Puls-Autokorrelation. Themenkomplexe (i) und (ii) wurden parallel bearbeitet. Zu diesem Zweck wurde das *time-dependent generalized-active-space configuration-interaction* (TD-GAS-CI) Verfahren weiterentwickelt sowie das konkurrierende Verfahren *multi-configuration time-dependent Hartree-Fock* (MC-TDHF) detailliert auf seine Anwendbarkeit im Fragestellungsbereich des FSP untersucht. Insbesondere das große Potenzial des TD-GAS-CI-Verfahrens zur Beschreibung der korrelierten Ionisationsdynamik konnte aufgezeigt werden. Weiterhin konnten Impulse zur Entwicklung neuer Spektroskopieverfahren im UV-Bereich geliefert werden. Dazu wurden Simulationspakete auf Basis des Lindblad-Formalismus erstellt, um offene Quantensysteme akkurat beschreiben zu können. Zentrale Ergebnisse betreffen das zeitaufgelöste Ionisationsverhalten zweiatomiger Moleküle mit neuen Resultaten

¹Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung gefördert. Die Verantwortung für den Inhalt der Veröffentlichung liegt beim Autor.

bspw. zur Winkelverteilung von Photoelektronen. Die Ergebnisse wurden fortlaufend in begutachteten Fachjournals publiziert und auf nationalen und internationalen Konferenzen präsentiert. Im Rahmen der Durchführung des Projektes entstanden Bachelor- und Master-Arbeiten sowie zentrale Teile einer künftigen Dissertation.

Bericht

1 Projektzielsetzung und Aufgabenstellung

In diesem Projekt sollten Computersimulationen und komplementäre analytische Zugänge entwickelt werden, die Experimente an Freie-Elektronen-Lasern im hohen Energie- und Intensitätsbereich beschreiben und vorhersagen. Von besonderem Interesse sollte dabei die Wechselwirkung der intensiven und hochenergetischen elektromagnetischen Strahlung dieser Lichtquellen mit Atomen und kleinen Molekülen sein.

Zentral sind hierbei stets sogenannte "Pump-Probe"-Experimente, bei denen ein zeitlicher Verlauf indirekt durch die Kombination zweier Pulse mit variablen Zeitversatz abgebildet werden kann. Hierbei gibt es die Möglichkeit, entweder zwei unterschiedliche Quellen zu verwenden (beispielsweise in einer sogenannten Streak-Kamera) oder Kopien desselben Pulses zu verwenden (Autokorrelation-Anordnung). Diese komplexen experimentellen Anordnungen benötigen ein fundiertes theoretisches Verständnis, um die gewonnenen Messdaten korrekt interpretieren zu können und um die physikalischen Mechanismen zu identifizieren. Ziel dieses Teilprojektes war es daher, elektronische Prozesse wie Ionisation, Zerfall angeregter Zustände und Dynamik wechselwirkender Elektronen, zeitlich aufgelöst zu beschreiben und die experimentelle Situation möglichst genau abzubilden. Dazu sollten umfangreiche Computersimulationen mit verschiedenen Methoden durchgeführt werden, welche seit vielen Jahren in meiner Gruppe entwickelt werden.

2 Voraussetzungen

Das Teilprojekt im Verbund "Freie-Elektronen-Laser: Untersuchung von Materie mit ultrakurzen, extrem intensiven Röntgenpulsen" (FSP-302) fand im Anschluss an das vom BMBF im Zeitraum 2010-2013 geförderte Vorhaben FSP-301 statt. Auf umfangreiche Vorarbeiten im Bereich der Software- und Methodenentwicklung konnte somit zurückgegriffen werden. Weiterhin konnten bestehende Kooperationen im Verbund, insbesondere mit Experimentalphysikkollegen der Universität Hamburg/DESY, vertieft werden. Das Vorhaben war weiterhin eingebettet in die Kooperation mit Wissenschaftlern der Universität Aarhus, Dänemark, deren Expertise und Vorarbeiten uns zur Durchführung des Projektes zur Verfügung standen. Sächliche Voraussetzungen der Universität Kiel (in Form von beispielsweise Großrechner-Zeit) standen ausreichend zur Verfügung, zudem war der Zugang zu Ressourcen des HLRN-Verbundes im Rahmen der Projekte "shp00006" und "shp00013", die speziell für die Fragestellungen des Verbundprojektes bewilligt wurden, ein wichtiger Baustein.

3 Planung und Ablauf

Der zeitliche Ablauf erfolgte insbesondere im Themenbereich der interferometrischen Autokorrelation in enger Abstimmung mit den Experimentalphysikkollegen (AG Prof. M. Drescher) und ergab sich aus aktueller Fragestellung der Forschung. Insbesondere Fortschritte bei der Methoden-Entwicklung hatten Einfluss auf die Auswahl der rechenbaren Systeme hinsichtlich Anzahl der aktiven Elektronen und Dimensionalität des untersuchten Systems. Die im Antrag formulierten Ziele konnten überwiegend erreicht werden, Anpassungen im Detail ergaben sich aus veränderten experimentellen Gegebenheiten. Die geplanten Rechnungen im Bereich des THz-Streakings wurden beispielsweise zu Gunsten von Simulationen und Entwicklungen zur Interferometrischen Autokorrelation verschoben.

4 Wissenschaftlicher und technischer Stand vor Projektbeginn

Die Erforschung der Wechselwirkung von Materie mit intensiver Laserstrahlung hat in den vergangenen zwei Jahrzehnten stark an Bedeutung gewonnen. Dies ist zum großen Teil darauf zurückzuführen, dass mit der physikalisch-technologischen Entwicklung kürzester und gleichzeitig intensiver und hochenergetischer Lichtpulse, erstmals die Dynamik von Elektronen in Atomen und Molekülen experimentell zugänglich wurde [1]. Damit ist es möglich geworden, die kleinsten Bestandteile, die unsere Alltagswelt maßgeblich beeinflussen, auf ihrer natürlichen räumlichen und zeitlichen Skala zu beobachten. Dies beinhaltet beispielsweise die Bildung und das Aufbrechen chemischer Verbindungen sowie die Zerstörung von Materialien durch starke Strahlung.

Zur Beschreibung und Interpretation dieser state-of-the-art Experimente ist eine zeitabhängige Theorie auf Basis der Quantenmechanik nötig, die es erlaubt, die gegenseitigen Wechselwirkungen beispielsweise der Elektronen korrekt zu berücksichtigen. Es existieren zahlreiche Ansätze (siehe z.B. [2]), jedoch kein allgemein akzeptiertes Verfahren, das universell eingesetzt werden kann. Für die Festkörper- und Oberflächenphysik steht hier beispielsweise die Dichtefunktionaltheorie zur Verfügung, welche bei Fragestellungen des FSP versagt.

Die Quantenchemie hat jedoch im Bereich der Strukturrechnungen für Atome und Moleküle in den letzten Jahrzehnten ein großes Arsenal an theoretischen Zugängen verfügbar gemacht, wie zum Beispiel "Configuration Interaction" (CI) und "Coupled-Cluster" (CC) Verfahren, sowie nichtlineare Multi-Configuration und Self-Consistent-Field Methoden. In diesem Bereich fehlt jedoch die Zeitabhängigkeit, welche für die korrekte Beschreibung von kurzen Anregungen, wie sie hier untersucht werden sollen, zwingend erforderlich ist. Daher sollte in diesem Projekt die Verallgemeinerung der quantenchemischen Zugänge und deren Nutzbarkeit für physikalische Anwendungen im FEL-Bereich untersucht werden.

5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Im Rahmen des geförderten Teilprojektes wurde eng mit der Gruppe um Prof. M. Drecher der Universität Hamburg kooperiert. Weiterhin wurden die zentralen Ergebnisse auf internationalen und nationalen Tagungen und Konferenzen vorgestellt sowie Ergebnisse mit anderen Gruppen ausgetauscht. Die einzelnen Beiträge sind im Abschnitt "Publikationen" aufgeführt. Weiterhin bestand eine enge Kooperation im Bereich der Simulationsentwicklung mit Prof. L. B. Madsen und Mitarbeitern an der Universität Aarhus, Dänemark. Es fanden regelmäßige Besuche von Dr. S. Bauch in seiner Gruppe statt. Eine weitere Zusammenarbeit im Bereich der Lösung der Lindblad-Gleichungen besteht mit Prof. P. Saalfrank, Universität Potsdam. Es fanden ebenfalls Besuche statt.

6 Ergebnisse

Die Bearbeitung des Projektes hat Ergebnisse in zwei Kategorien ergeben: zum Einen konnten physikalische Erkenntnisse an Molekülen gewonnen werden [3, 4, 5], zum Anderen spielte die Methodenentwicklung eine zentrale Rolle [6, 7, 8, 9]. Letztere hat insbesondere große Bedeutung für zukünftige Anwendungen und Untersuchungen in verschiedenen Anwendungsfeldern. Nebenprodukte eignen sich zur Weiterverwendung auch außerhalb des Fachbereiches im Bereich des High-Performance-Computings [10].

6.1 Zeitabhängige Elektronendynamik

In diesem Projekt wurden bestehende Ansätze der Theoretischen Physik und der Theoretischen Chemie auf ihre Eignung zur Beschreibung der Fragestellungen weiter untersucht und angepasst. Dabei wurde ein neues Werkzeug entwickelt, welches auch zukünftig für Anwendungen zur Verfügung steht: Es konnte ein Code-Paket auf Basis der TD-GAS-CI Methode [11, 12, 2, 6] in einer partiell-rotierten Basis mit einer Darstellung in prolata-spheroidalen Koordinaten erstellt werden, welches erstmals effizient die Wechselwirkung mehrerer Elektronen vor, während und nach der Ionisation auf dem Weg zu einem Detektor simulieren kann [6, 3, 5]. Dies erlaubte es, die Dynamik von mehreren Elektronen bei der Ionisation von zweiatomigen Molekülen (beispielsweise Wasserstoff und LiH) zu verfolgen und zu interpretieren. Erstmals konnten somit Ergebnisse für die winkelaufgelöste Photoionisation im Rahmen einer zeitabhängigen Theorie in voller Dimensionalität gewonnen werden.

Es konnte demonstriert werden, dass die Korrelation zwischen den Elektronen (ein wichtiger quantenmechanischer Effekt) einen erheblichen Einfluss auf die beobachtbaren Größen hat [3, 4]. Ebenfalls mit Hilfe der TD-GAS-CI-Methode konnten wir eine detaillierte Untersuchung des sogenannten "Enhanced Ionization"-Mechanismus in Molekülen durchführen [13, 14]. Dabei konnten wir den Einfluss von elektronischen Korrelationen auf das Ionisationsverhalten mit Hilfe von Modellsystemen für das zweiatomige Wasserstoff-Molekül mit zwei aktiven Elektronen sowie für das LiH-Molekül mit

bis zu vier aktiven Elektronen durchführen. Die Arbeit ist in Zusammenarbeit mit der Gruppe von Prof. Lars Bojer Madsen an der Universität Aarhus durchgeführt worden. In diesem Themenkomplex haben wir ebenfalls eine abschließende Untersuchung des nicht-linearen Verfahrens "Multi-Configuration-Time-Dependent Hartree-Fock" (MC-TDHF) [2, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21] durchgeführt. Vor Projektbeginn war nicht abzusehen, welche Methode schlussendlich den geeigneten Zugang zur Elektronendynamik in externen Feldern bietet. MCTHDF wurde und wird in der Literatur häufig erfolgreich im Umfeld der Atomkern-Dynamik in Molekülen und ähnlichen Bereichen eingesetzt. Es existieren mittlerweile zahlreiche Varianten und Verallgemeinerungen [24, 25, 22, 23, 26].

In diesem Projekten konnten wir jedoch zeigen [7, 8], dass diese Methode für die Behandlung aktueller Fragestellungen des Forschungsschwerpunktes nicht geeignet ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass das Verfahren hochgradig nichtlinear ist und die Gleichungen numerische und konzeptionelle Instabilitäten aufweisen. Dies macht eine Anwendung über die bereits etablierten Fragestellungen hinaus äußerst schwierig bis unmöglich. Auch dieses Negativ-Resultat ist ein wichtiger Schritt hin zu einer akkuraten Beschreibung und erforderte große Sorgfalt und ein hohes Maß an Softwareentwicklung. Ein Nebenprodukt dieser Aktivitäten ist die Entwicklung einer Numerik-Bibliothek, die sich speziell mit der Parallelisierung von großen Problemen der numerischen Linearen Algebra befasst, und im Anschluss an dieses Projekt anderen Wissenschaftlern unterschiedlichster Fachrichtungen zur Verfügung gestellt werden soll [10].

In der Perspektive ist zu erwarten, dass das oben genannte Simulations-Werkzeug auf Basis der TD-GAS-CI-Methode im Vergleich zu MC-TDHF besser geeignet ist, und es auch in Zukunft wichtige Beiträge zum Verständnis der Wechselwirkung von kurzen und intensiven Pulsen, wie sie beispielsweise moderne Freie-Elektronen-Laser liefern, mit Atomen und Molekülen ermöglichen wird und sich als Standard-Werkzeug etablieren wird.

6.2 Interferometrische Autokorrelation

Unsere langjährige Kooperation im Rahmen des Verbundprojektes mit der experimentellen Gruppe um Prof. Markus Drescher der Universität Hamburg konnten wir fortsetzen und Ergebnisse zur interferometrischen Autokorrelation an Sauerstoff gewinnen. Zur theoretischen Beschreibung der Experimente haben wir Code-Pakete auf Basis des Lindblad-Formalismus entwickelt, welcher eine Beschreibung offener Quantensysteme ermöglicht. Hierbei können Zerfalls- und Dephasierungseffekte, die in experimentell zugänglichen Observablen sichtbar werden, durch die Wechselwirkung mit einem Bad berücksichtigt werden. Damit kann die experimentelle Situation, bei der viele Moleküle miteinander wechselwirken können, abgebildet werden.

Die Entwicklung dieser Simulations-Tools war sehr aufwändig, da verschiedene Verfahren kombiniert werden mussten, um sowohl eine genaue Beschreibung der Materialeigenschaften zu erhalten, als auch die Entwicklung der Dynamik im Experiment simulieren zu können. Dazu wurden auf Basis quantenchemischer Rechnungen und experimenteller Daten die Grundzustandseigenschaften eines einzelnen Moleküls ermittelt. Diese Daten wurden anschließend in einer Simulation der Dynamik auf Basis

des Lindblad-Formalismus genutzt. Die Methode und die Beschreibung der Simulationen sowie erste Resultate für Sauerstoff sind in einer Master-Arbeit von M. Segnon ausführlich dargestellt [9].

Die Ergebnisse der numerischen Simulationen sind vielversprechend und bestätigen erste experimentelle Trends. Zum Austausch von Ideen fand im Verlauf der Projektphase ein Besuch bei der Theorie-Gruppe von Prof. Peter Saalfrank der Universität Potsdam statt, die sich seit vielen Jahren mit ähnlichen Fragestellungen beschäftigt.

6.3 Weitere Fortschritte und Entwicklungen

Im Rahmen der Entwicklung der MC-TDHF und TD-GAS-CI-Simulationspakete entstand eine allgemeine bibliotheksbasierte Programmierumgebung, die eine Programmierung unterschiedlicher Großrechnersysteme vereinfacht und zusammenfasst. Diese ermöglicht auch zukünftig die Nutzung der stark unterschiedlichen Strukturen moderner Großrechnerarchitekturen mit oftmals vielen parallelen heterogenen Strukturen, wie CPU- und GPU-basierten Teil-Rechnern. Üblicherweise erfordert dies hochspezialisierte Software, die für die unterschiedlichen Systeme stets angepasst oder neu geschrieben werden muss. Die hier entwickelte Software erlaubt die Entwicklung physikalischer Simulations-Software unabhängig vom Zielsystem und nimmt dem Anwender die Anpassung auf die zu Grunde liegende Rechner-Architektur weitestgehend ab. Diese Arbeit wurde maßgeblich von Herrn Christopher Hinz vorangetrieben. Das Projekt hat mittlerweile eine Web-Präsenz unter dem Namen "Qubus" [10] und hat bei seiner Präsentation auf Fachkonferenzen starken Zuspruch erhalten.

7 Voraussichtlicher Nutzen

Die entwickelten Methoden und Programmpakete für die Beschreibung von Korrelationseffekten in intensiven und kurzen Lichtfeldern bieten die einzigartige Möglichkeit, moderne Experimente auf Basis der quantenmechanischen Vielteilchendynamik erstmals akkurat zu beschreiben. Ein großes Anwendungspotential bieten zusätzlich die entwickelten Bibliotheken und numerischen Tools. Diese können auch außerhalb der Fach-Community eingesetzt werden.

8 Fortschritte bei anderen Stellen

Die Beschreibung der Elektronendynamik ist Ziel von zahlreichen Arbeitsgruppen weltweit. Daher war ein kontinuierlicher Austausch mit anderen Wissenschaftlern im Rahmen von Konferenzen und gegenseitigen Besuchen unabdingbar. Neben unseren Anstrengungen zur Methoden-Entwicklung sind hier insbesondere die Arbeiten von Miyagi und Madsen [22, 23], von D. Bauer (Uni Rostock) und Mitarbeitern [24, 25] und anderen [26] zu nennen. Die angesprochenen Probleme der MC-TDHF Methode, die im Verlauf der Projektphase aufgezeigt werden konnten, werden mittlerweile auch von anderen adressiert [27].

Publikationen

Publikationen in Fachjournalen

2016

- C. M. Hinz, S. Bauch, und M. Bonitz, "Instabilities and inaccuracies of multi-configuration time-dependent Hartree-Fock: the case of photoionization", in Vorbereitung (2016)
- D. Azoury, M. Krüger, G. Orenstein, H. R. Larsson, S. Bauch, B. D. Bruner und N. Dudovich, "Attosecond multi-dimensional spectroscopy", eingereicht (2016)
- H. R. Larsson, S. Bauch, L. K. Sørensen, und M. Bonitz, "Correlation effects in strong-field ionization of heteronuclear diatomic molecules", *Physical Review A* **93**, 013426 (2016)
- C. M. Hinz, S. Bauch, und M. Bonitz, "Instabilities and inaccuracies of multi-configurational time-dependent Hartree-Fock", *Journal of Physics: Conference Series* **696**, 012009 (2016)
- S. Bauch, H. R. Larsson, C.M. Hinz, und M. Bonitz, "The time-dependent generalized active space configuration interaction approach to correlated ionization dynamics of diatomic molecules", *Journal of Physics: Conference Series* **696**, 012008 (2016)

2015

- S. Chattopadhyay, S. Bauch, und L. B. Madsen, "Electron-correlation effects in enhanced ionization of molecules: A time-dependent generalized-active-space configuration-interaction study", *Physical Review A* **92** 063423 (2015)

2014

- S. Bauch, L. K. Sørensen and L. B. Madsen, "Time-dependent generalized-active-space configuration-interaction approach to photoionization dynamics of atoms and molecules", *Physical Review A* **90**, 062508 (2014)
- D. Lacroix, S. Hermanns, C. Hinz, and M. Bonitz, "Ultrafast dynamics of finite Hubbard clusters - a stochastic mean field approach", *Physical Review B* **90**, 125112 (2014)

2013

- D. Hochstuhl, C. Hinz, und M. Bonitz "Time-dependent multiconfiguration methods for the numerical simulation of photoionization processes of many-electron atoms.", *European Physical Journal - Special Topics* **223** No. 2, 177-336 (2014)

Weitere Publikationen und Arbeiten

- Master-Arbeit "Interferometric Two-Pulse Correlation in Dissipative Quantum Systems", Mawussey Segnon (2015), Betreuung durch Dr. S. Bauch, durchgeführt am Lehrstuhl von Prof. M. Bonitz
- Bachelor-Arbeit "Post-Collision-Interaction in laserangeregten Edelgasclustern", Jan-Niklas Toelstede (2015), Betreuung durch Dr. S. Bauch, durchgeführt am Lehrstuhl von Prof. M. Bonitz
- Qubus-Framework Veröffentlichung auf <http://qbb-project.org>
- Master-Arbeit "Laser-Induced Correlated Electron Dynamics in Small Molecules", Henrik Larsson (2014), Betreuung durch Dr. S. Bauch, durchgeführt an den Lehrstühlen von Prof. M. Bonitz und Prof. B. Hartke (Kiel)

Beiträge auf Konferenzen und Vorträge**2016**

- S. Bauch: Hauptvortrag "Describing the correlated electron dynamics in atoms and molecules", DPG-Frühjahrstagung Hannover (2016)
- S. Bauch, L. Yue, H. R. Larsson, und M. Bonitz: "Using GAS-Cl to extract atomic and molecular structure factors for tunneling ionization", Posterbeitrag DPG-Frühjahrstagung Hannover (2016)
- C. M. Hinz "Qubus - A toolkit for building reusable and powerful computer simulations" Vortrag am INP Greifswald (2016)
- C. M. Hinz, S. Bauch, und M. Bonitz: "Instabilities and Inaccuracies of Multi-Configuration Time-dependent Hartree-Fock Applied to Atomic Systems" Posterbeitrag DPG-Frühjahrstagung Hannover (2016)

2015

- M. Bonitz: "Laser induced electron dynamics in atoms and molecules", Vortrag im Seminar am Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg, in Straßburg, Frankreich (2015)
- S. Bauch, M. Segnon, und M. Bonitz: "Coherent and dissipative dynamics during the ionization of molecules", Vortrag im Institutsseminar der Universität Potsdam (AG Prof. P. Saalfrank) (2015)
- S. Bauch, H. R. Larsson, C. Hinz, und M. Bonitz: "The time-dependent generalized active space configuration interaction approach to photoionization of multielectron atoms and molecules", Vortrag auf der CERF15 Konferenz in Rostock (2015)

- S. Bauch, H. R. Larsson, C. Hinz, und M. Bonitz: "The time-dependent generalized active space configuration interaction approach to correlated ionization dynamics", Posterbeitrag auf der PNGF6 Konferenz in Lund, Schweden (2015)
- C. M. Hinz, S. Bauch, S. Hermanns, N. Schlünzen, und M. Bonitz: "Towards a unified numerical framework for quantum mechanical simulations", Posterbeitrag auf der PNGF6 Konferenz in Lund, Schweden (2015)
- C. M. Hinz, S. Bauch, S. Hermanns, N. Schlünzen, und M. Bonitz: "Towards a unified numerical framework for quantum mechanical simulations", Posterbeitrag auf dem 599. Heraeus Seminar "Isolated Many-Body Quantum Systems out of Equilibrium: From Unitary Time Evolution to Quantum Kinetic Equations" in Bad Honnef (2015)

2014

- L. K. Sørensen: STC (Symposium on Theoretical Chemistry) in Wien 2014, Titel des Posterbeitrages "Time-Dependent Generalized-Active-Space Configuration Interaction (TD-GASCI)"
- L. K. Sørensen: Invited talk "The Time-Dependent Generalized-Active-Space Configuration-Interaction approach for the many-electron problem", Potsdam (Gruppe von P. Saalfrank)
- L. K. Sørensen: Invited talk "The Time-Dependent Generalized-Active-Space Configuration-Interaction approach for the many-electron problem", Uppsala, Schweden (Gruppe von R. Lindh)
- S. Bauch: Invited talk "The Time-Dependent Generalized-Active-Space Configuration-Interaction Approach to the Photoionization of Atoms and Molecules", Workshop "Perspectives of ultrafast physics light-induced dynamics in atoms and molecules", CFEL Hamburg (2014)
- S. Bauch, L. K. Sørensen, und L. B. Madsen: "Time-Dependent Generalized Active Space Configuration Interaction Approach to Ultrafast Dynamics in Atoms and Molecules", Posterpräsentation DPG-Tagung in Berlin, 2014
- C. Hinz: "Nonlinear photo-ionization dynamics using MC-TDHF and Time-dependent RASCI", Posterpräsentation DPG-Tagung in Berlin, 2014
- C. Hinz: "Stochastic mean-field approach to non-equilibrium dynamics of correlated systems", Posterpräsentation DPG-Tagung in Dresden, 2014
- H. R. Larsson, S. Bauch, L. K. Sørensen, C. Hinz, und M. Bonitz: "Correlation and asymmetry effects in strong-field ionization of a heteronuclear molecule", Posterpräsentation auf der Tagung "Coherence and Control in the Quantum World: Current and Future Trends", Weizman Institute of Science, Israel, Dezember 2014

- S. Bauch, M. Bonitz, L. K. Sørensen, C. Hinz, Zwischenbericht Teilprojekt "Zeitaufgelöste Photoionisation am FEL — Nichtlineare Effekte, Kohärenz und Korrelationen in Atomen und Molekülen" FSP-302 Treffen, Hamburg (2014)

2013

- C. Hinz, D. Hochstuhl, und M. Bonitz: "Photoionization of many-electron atoms using time-dependent multiconfiguration methods", Vortrag auf der Tagung "Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems", Trento, Italien (2013)
- M. Bonitz, S. Hermanns, und C. Hinz: "Quantum Dynamics of Finite Hubbard Clusters", Vortrag auf der Tagung "Advances in time-dependent methods for quantum many-body systems", Trento, Italien (2013)
- C. Hinz, D. Hochstuhl, und M. Bonitz: "Investigation of shake-up processes in Beryllium using the multiconfigurational time-dependent Hartree-Fock method", Posterbeitrag auf der Tagung "XVII. international Conference on Recent Progress in Many Body Theories", Rostock (2013)

8.1 Nachwuchsförderung und Öffentlichkeitsarbeit

2016

- S. Bauch: Ringvorlesung Numerik von der CAU Kiel "Kurzzeitdynamik von Quanten-Vielteilchensystemen" (2016)

2015

- M. Bonitz: Ringvorlesung Numerik von der CAU Kiel "Quanten-Vielteilchen im Gleichgewicht" (2015)
- Ein-wöchiges Einführungspraktikum "Numerik" für Bachelor- und Master-Studierende mit forschungsgrelevanten Schwerpunkten (März 2015)
- Abschluss der Master-Arbeit von Mawussey Segnon im Sommersemester 2015
- Abschluss der Bachelor-Arbeit von Jan-Niklas Toelstede im Sommersemester 2015
- S. Bauch: Vorlesung "Teilchen und Felder II" (Neuausarbeitung), die speziell den wissenschaftlichen Nachwuchs an die Thematiken des Forschungsschwerpunktes heranführen soll

2014

- Planung und Betreuung eines Projektes bei der PPPT2014, Frauenförderprogramm an der Sektion Physik der CAU Kiel
- Abschluss der Master-Arbeit von Henrik R. Larsson
- Einwöchiges Praktikum für Bachelor-Studierende im Wintersemester 2014

Literatur

- [1] F. Krausz und M. Ivanov, "Attosecond physics", *Rev. Mod. Phys.* **81**, 163 (2009)
- [2] D. Hochstuhl, C. M. Hinz, und M. Bonitz, "Time-dependent multiconfiguration methods for the numerical simulation of photoionization processes of many-electron atoms", *The European Physical Journal Special Topics* **223**, 177-336 (2014)
- [3] H. R. Larsson, S. Bauch, L. K. Sørensen, und M. Bonitz, "Correlation effects in strong-field ionization of heteronuclear diatomic molecules", *Phys. Rev. A* **93**, 013426 (2016)
- [4] Henrik R. Larsson, "Laser-Induced Correlated Electron Dynamics in Small Molecules", Master-Arbeit, Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, CAU Kiel, Lehrstuhl von Prof. Bonitz (2014)
- [5] S. Bauch, H. R. Larsson, C.M. Hinz, und M. Bonitz, "The time-dependent generalized active space configuration interaction approach to correlated ionization dynamics of diatomic molecules", *J. Phys.: Conf. Ser.* **969**, 012008 (2016)
- [6] S. Bauch, L. K. Sørensen, und L. B. Madsen, "Time-dependent generalized-active-space configuration-interaction approach to photoionization dynamics of atoms and molecules", *Phys. Rev. A* **90**, 062508 (2014)
- [7] C. M. Hinz, S. Bauch, und M. Bonitz, "Instabilities and inaccuracies of multi-configurational time-dependent Hartree-Fock", *J. Phys.: Conf. Ser.* **696**, 012009 (2016)
- [8] C. M. Hinz, S. Bauch, und M. Bonitz, "Instabilities and inaccuracies of multi-configuration time-dependent Hartree-Fock: the case of photoionization", in Vorbereitung (2016)
- [9] Mawussey Segnon "Interferometric Two-Pulse Correlation in Dissipative Quantum Systems", Master-Arbeit, Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, CAU Kiel, Lehrstuhl von Prof. Bonitz (2015)
- [10] Qubus-Framework Veröffentlichung auf <http://qbb-project.org>
- [11] D. Hochstuhl und M. Bonitz, "Time-dependent restricted-active-space configuration-interaction method for the photoionization of many-electron atoms", *Phys. Rev. A* **86**, 053424 (2012)
- [12] D. Hochstuhl und M. Bonitz, "Time-dependent restricted active space Configuration Interaction theory applied to the photoionization of neon", *J. Phys: Conf. Ser.* **427**, 012007 (2013)
- [13] S. Chattopadhyay, S. Bauch, und L. B. Madsen, "Electron-correlation effects in enhanced ionization of molecules: A time-dependent generalized-active-space configuration-interaction study", *Phys. Rev. A* **92**, 063423 (2015)

- [14] S. Chattopadhyay, S. Bauch, H.R. Larsson, und L.B. Madsen, "N.N.", in Vorbereitung (2016)
- [15] D. Hochstuhl und M. Bonitz, "Two-photon ionization of helium studied with the multiconfigurational time-dependent Hartree–Fock method", *J. Chem. Phys.* **134**, 084106 (2011)
- [16] J. Caillat, J. Zanghellini, M. Kitzler, O. Koch, W. Kreuzer, und A. Scrinzi, "Correlated multielectron systems in strong laser fields: A multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock approach", *Phys. Rev. A* **71**, 012712 (2005)
- [17] J. Zanghellini, M. Kitzler, T. Brabec, und A. Scrinzi, "Testing the multiconfiguration time-dependent Hartree-Fock method", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37**, 763 (2004)
- [18] T. Kato und H. Kono, "Time-dependent multiconfiguration theory for electronic dynamics of molecules in an intense laser field", *Chem. Phys. Lett.* **392**, 533–540 (2004)
- [19] M. Nest, T. Klamroth, und P. Saalfrank, "The multiconfiguration time-dependent Hartree–Fock method for quantum chemical calculations", *J. Chem. Phys.* **122**, 124102 (2005)
- [20] H.-D. Meyer, U. Manthe, und L. S. Cederbaum, "The multi-configurational time-dependent Hartree approach", *Chem. Phys. Lett.* **165**, 73-78 (1990)
- [21] U. Manthe, H.-D. Meyer, und L. S. Cederbaum, "Wave-packet dynamics within the multiconfigurational Hartree framework: General aspects and application to NOCl", *J. Chem. Phys.* **97**, 3199–3213 (1992)
- [22] H. Miyagi und L. B. Madsen, "Time-dependent restricted-active-space self-consistent-field theory for laser-driven many-electron dynamics", *Phys. Rev. A* **87**, 062511 (2013)
- [23] H. Miyagi und L. B. Madsen, "Time-dependent restricted-active-space self-consistent-field singles method for many-electron dynamics", *J. Chem. Phys.* **140**, 164309 (2014)
- [24] M. Brics und D. Bauer, "Time-dependent renormalized natural orbital theory applied to the two-electron spin-singlet case: Ground state, linear response, and autoionization", *Phys. Rev. A* **88**, 052514 (2013)
- [25] M. Brics, J. Rapp, und D. Bauer, "Strong-field absorption and emission of radiation in two-electron systems calculated with time-dependent natural orbitals", *Phys. Rev. A* **93**, 013404 (2016)
- [26] T. Sato und K. L. Ishikawa, "Time-dependent complete-active-space self-consistent-field method for multielectron dynamics in intense laser fields", *Phys. Rev. A* **88**, 023402 (2013)

- [27] U. Manthe, “The multi-configurational time-dependent Hartree approach revisited”, *J. Chem. Phys.* **142**, 244109 (2015)