

Anhang A

Parameter der dreidimensionalen Rechnungen

Potentialflächen

Die analytische Funktion für die in den dreidimensionalen Wellenpaketrechnungen verwendeten Potentialhyperflächen des elektronische Grundzustands und des elektronisch angeregten Zustands des Systems CO/Cr₂O₃ besteht in der Abstandskoordinate Z aus vier Termen:

$$f = u_0 + u_1/z^3 + u_2/z^4 + u_3 \exp(-u_4(z - u_5)^2)$$

wo u_i ($i \neq 0$) Fourier-artige Entwicklungen nach den Winkelkoordinaten θ und ϕ sind. Die Länge dieser Entwicklungen wurde für die beiden Zustände unterschiedlich gewählt, z.B. für den Grundzustand:

$$u_i = \sum_{j=0}^4 v_{ji} \cos(j\phi), \quad \text{für } i \neq 0$$

und

$$v_{ji} = \sum_{k=0}^3 a_{kji} \cos(k\theta) + \sum_{k=1}^3 b_{kji} \sin(k\theta), \quad \text{für } j = 0$$

$$v_{ji} = \sum_{k=1}^3 c_{kji} \sin(k\theta), \quad \text{für } j \neq 0$$

und jeweils um 1 kürzere Summenentwicklungen für den angeregten Zustand. u_0 , a_{kji} , b_{kji} and c_{kji} sind anzupassende Parameter, deren Werte mit Hilfe der üblichen Fitalgorithmen bestimmt wurden.

Wellenpaketrechnungen*Konstanten*

Masse CO-Molekül	$M=51040.8724$ au
Trägheitsmoment CO-Molekül	$I=56829.7084$ au
Reduzierte Masse CO-Molekül	$\mu=12499.8055$ au
Interner C-O-Abstand	$R=2.13224$ au

Z-Gitter

Gitterbeginn	$Z_{min} = 2.0$ au
Gitterende	$Z_{max} = 15.0$ au
Anzahl Gitterpunkte	$N_Z = 256$
Gitterpunktabstand	$\Delta Z = 0.051$ au
Maximaler Impuls	$k_{zmax} = 61.6$ au
Auflösung im Impulsraum	$\Delta kZ = 0.48$ au

Gitterwechsel

Transferfunktion	$f_{trans} = 1/(1 + \exp(a \cdot (Z - Z_0)))$ mit $a=6.0/\text{au}$ und $Z_0=12.5$ au
Gitterbeginn	$Z2_{min} = 10.16$ au
Gitterende	$Z2_{max} = 16.63$ au
Anzahl Gitterpunkte	$N2_Z = 128$
Gitterpunktabstand	$\Delta Z_2 = 0.051$ au
Maximaler Impuls	$k2_{zmax} = 61.6$ au
Auflösung im Impulsraum	$\Delta kZ_2 = 0.96$ au

 θ -Gitter

Anzahl Gitterpunkte	$N_\theta = 80$
Gitterpunkte	Nullstellen des Legendrepolynoms P_{80}^0
Maximale Rotationsquantenzahl	$J_{max} = 79$

 ϕ -Gitter

	(periodisch im Bereich $[0:2\pi]$)
Gitterbeginn	$\phi_{min} = 0.02$ au
Gitterende	$\phi_{max} = 6.26$ au
Anzahl Gitterpunkte	$N_\phi = 159$
Gitterpunktabstand	$\Delta \phi = 0.04$ au
Maximale Projektionsquantenzahl	$M_{max} = 79$
Auflösung im M-Raum	$\Delta M = 1$ au

Imaginärzeitpropagation

Startwellenpaket	$\psi_0 = \exp(-5(Z - 4.6)^2) \cdot \exp(-5(\theta - 1.5707)^2)$ $\cdot \exp(-5(\phi - 3.1414927)^2)$ (normiert)
Splitpropagator mit Zeitschritt	$\Delta t = 100$ au
Propagationszeit	$t_{max}=40000$ au jeweils für Zustände 0-2 $t_{max}=150000$ au für Zustand 3 $t_{max}=80000$ au für Zustand 4 $t_{max}=120000$ au für Zustand 5

*Realzeitpropagation**(angeregter Zustand)*

Splitpropagator mit Zeitschritt	$\Delta t = 10$ au
Propagationszeit	$t_{max}=4000$ au
'Lebensdauergitter' (Gadzuk)	
beginnt bei	$t_1=50$ au
'Lebensdauergitterpunkt- Abstand' (Gadzuk)	$\Delta t_n=50$ au
Anzahl der betrachteten Lebensdauern	$N=80$

*Realzeitpropagation**(Grundzustand)*

Splitpropagator mit Zeitschritt	$\Delta t = 50$ au
Propagationszeit	$t_{max}=60000$ au (inklusive Propagation im angeregten Zustand)

