

Literaturverzeichnis

- [1] A. H. Zewail. *Science* **242**, 1645 (1988).
- [2] L. R. Khundkar und A. H. Zewail. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **41**, 15 (1990).
- [3] A. H. Zewail und R. Bernstein. In A. H. Zewail, Herausgeber, *The Chemical Bond*. Academic Press, New York (1992).
- [4] A. H. Zewail. *Scientific American* Seite 40 (Dezember 1990).
- [5] A. H. Zewail. *Science* **242**, 1645 (1988).
- [6] M. Gruebele und A. H. Zewail. *Physics Today* **May**, 24 (1990).
- [7] D. E. Gray, Herausgeber. *American Institute of Physics Handbook*. McGraw-Hill, New York (1972).
- [8] E. J. Heller. *J. Chem. Phys.* **68**, 2066 (1978).
- [9] E. J. Heller. *J. Chem. Phys.* **69**, 3891 (1978).
- [10] E. J. Heller. *Acc. Chem. Res.* **14**, 368 (1981).
- [11] R. Kosloff. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **45**, 145 (1994).
- [12] D. Kosloff und R. Kosloff. *J. Comput. Phys.* **52**, 35 (1983).
- [13] J. Manz und L. Wöste, Herausgeber. *Femtosecond Chemistry*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1995).
- [14] J. Manz. In V. Sundström, Herausgeber, *Femtochemistry and Femtobiology*. World Scientific, Singapore (1998). Im Druck.
- [15] D. J. Tannor, R. Kosloff und A. Rice. *J. Chem. Phys.* **85**, 5805 (1986).
- [16] A. H. Zewail. *J. Phys. Chem.* **97**, 12427 (1993).

- [17] A. H. Zewail. In J. Manz und L. Wöste, Herausgeber, *Femtosecond Chemistry*, Band 1, Kapitel 2. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1995).
- [18] T. Baumert, G. Gerber. *Israel J. Chem.* **34**, 103 (1994).
- [19] T. Baumert, R. Thalweiser, V. Weiss und G. Gerber. In J. Manz und L. Wöste, Herausgeber, *Femtosecond Chemistry*, Band 2, Kapitel 14. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1995).
- [20] J. August, M. Brouard und J. P. Simons. *J. Chem. Soc., Faraday Trans.* **84**, 587 (1988).
- [21] A. Sinha, R. L. Vander Wal und F. F. Crim. *J. Chem. Phys.* **91**, 2929 (1989).
- [22] Y. Y. Bai und G. A. Segal. *J. Chem. Phys.* **92**, 7479 (1990).
- [23] P. R. Fleming, M. Li und T. R. Rizzo. *J. Chem. Phys.* **94**, 2425 (1991).
- [24] G. K. Paramonov. In J. Manz und L. Wöste, Herausgeber, *Femtosecond Chemistry*, Band 2, Kapitel 23. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1995).
- [25] E. Schrödinger. *Naturwiss.* **14**, 666 (1926).
- [26] J. E. Combariza, B. Just, J. Manz und G. K. Paramonov. *J. Phys. Chem.* **95**, 10351 (1991).
- [27] M. Dohle, J. Manz, G. K. Paramonov und H. Quast. *Chem. Phys.* **197**, 91 (1995).
- [28] M. V. Korolkov, J. Manz und G. K. Paramonov. *J. Chem. Phys.* **105**, 10874 (1996).
- [29] C. M. Dion, S. Chelkowski, A. D. Bandrauk, H. Umeda und Y. Fujimura. *J. Chem. Phys.* **105**, 9083 (1996).
- [30] W. Jakubetz, B. L. Lan und V. Parasuk. In M. Chergui, Herausgeber, *Femtosecond Chemistry and Physics of Ultrafast Processes*, Seite 86. World Scientific, Singapore (1996).
- [31] D. J. Tannor und S. A. Rice. *J. Chem. Phys.* **83**, 5013 (1985).
- [32] D. J. Tannor, R. Kosloff und S. A. Rice. *J. Chem. Phys.* **85**, 5805 (1986).
- [33] C. D. Schwieters und H. Rabitz. *Phys. Rev. A* **44**, 5224 (1991).
- [34] B. Amstrup und N. E. Henriksen. *J. Chem. Phys.* **97**, 8285 (1992).

- [35] M. Shapiro und P. Brumer. *J. Chem. Phys.* **98**, 201 (1993).
- [36] J. Manz und C. S. Parmenter. *Chem. Phys.* **139**, 1 (1989).
- [37] R. Marquardt und M. Quack. *J. Chem. Phys.* **95**, 4854 (1991).
- [38] G. K. Paramonov. *Chem. Phys. Letters* **250**, 505 (1996).
- [39] M. Kaluža und J. T. Muckerman. *J. Chem. Phys.* **102**, 3897 (1995).
- [40] J. E. Combariza, C. Daniel, B. Just, E. Kades, E. Kolba, J. Manz, W. Malisch, G. K. Paramonov und B. Warmuth. In J. E. Kaye, Herausgeber, *Isotope Effects in Gas-Phase Chemistry*, Seite 310. American Chemical Society, Washington (1992).
- [41] R. J. Gordon und S. A. Rice. *Ann. Rev. Phys. Chem.* **48**, 601 (1997).
- [42] S. A. Rice. *Adv. Chem. Phys.* **101**, 213 (1997).
- [43] G. K. Paramonov und V. A. Savva. *Phys. Letters A* **97**, 340 (1983).
- [44] G. K. Paramonov, V. A. Savva und A. M. Samson. *Infrared Phys.* **25**, 201 (1985).
- [45] Z. E. Dolya, N. B. Nazarova, G. K. Paramonov und V. A. Savva. *Chem. Phys. Letters* **145**, 499 (1988).
- [46] G. K. Paramonov. *Phys. Letters A* **152**, 191 (1991).
- [47] W. Jakubetz, B. Just, J. Manz und H.-J. Schreier. *J. Phys. Chem.* **94**, 2294 (1990).
- [48] B. Just, J. Manz und G. K. Paramonov. *Chem. Phys. Letters* **193**, 429 (1992).
- [49] B. Just, J. Manz und J. Trisca. *Chem. Phys. Letters* **193**, 423 (1992).
- [50] G. K. Paramonov. *Chem. Phys.* **177**, 169 (1993).
- [51] A. E. Bryson und Y. Ho. *Applied Optimal Control*. Hemisphere, New York (1975).
- [52] W. Jakubetz, J. Manz und H.-J. Schreier. *Chem. Phys. Letters* **165**, 100 (1990).
- [53] W. Jakubetz, E. Kades und J. Manz. *J. Phys. Chem.* **97**, 12609 (1993).
- [54] S. Shi, A. Woody und H. Rabitz. *J. Chem. Phys.* **88**, 6870 (1988).

- [55] A. P. Pierce, M. A. Dahleh und H. Rabitz. *Phys. Rev. A* **37**, 1988 (1988).
- [56] S. Shi und H. Rabitz. *Chem. Phys.* **139**, 185 (1989).
- [57] V.S. Letokhov. *Science* **180**, 451 (1973).
- [58] F. F. Crim. *J. Phys. Chem.* **100**, 12725 (1996).
- [59] P. F. Zittel und D. D. Little. *J. Chem. Phys.* **71**, 713 (1979).
- [60] P. F. Zittel und D. D. Little. *J. Chem. Phys.* **72**, 5900 (1980).
- [61] P. F. Zittel und D. D. Little. *Chem. Phys.* **63**, 227 (1981).
- [62] P. F. Zittel und D. E. Masturzo. *J. Chem. Phys.* **85**, 4362 (1986).
- [63] D.G. Imre und J. Zhang. *Chem. Phys.* **139**, 89 (1989).
- [64] J. Zhang, C. W. Riehn, M. Dulligan und C. Wittig. *J. Chem. Phys.* **103**, 6815 (1995).
- [65] D. J. Kligler, H. Pummer, W. K. Bischel und C. K. Rhodes. *J. Chem. Phys.* **69**, 4652 (1978).
- [66] W. K. Bischel, J. Bokor, J. Dallarosa und C. Rhodes. *J. Chem. Phys.* **70**, 5593 (1979).
- [67] P. A. Leighton. *Photochemistry of Air Pollution*. Academic Press, New York, N. Y. (1961).
- [68] R. P. Wayne. *Chemistry of Atmospheres*. Oxford, New York, zweite Auflage (1991).
- [69] *JANAF Thermochemical Tables*, Washington, D. C. National Bureau of Standards.
- [70] H. Johnston und R. Graham. *J. Phys. Chem.* **77**, 62 (1973).
- [71] F. Biaueme. *J. Photochem.* **2**, 139 (1973-74).
- [72] D. Bingemann, M. P. Gorman, A. M. King und F. F. Crim. *J. Chem. Phys.* **107**, 661 (1997).
- [73] N. Rosen. *J. Chem. Phys.* **1**, 319 (1933).
- [74] E. Thiele und D. J. Wilson. *J. Chem. Phys.* **35**, 1256 (1961).

- [75] M. Born und R. Oppenheimer. *Ann. Phys.* **84**, 457 (1927).
- [76] D. R. Hartree. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **24**, 111 (1928).
- [77] C. Møller und M. S. Plesset. *Phys. Rev.* **46**, 618 (1934).
- [78] H.-J. Werner. In K. P. Lawley, Herausgeber, *Ab initio Methods in Quantum Chemistry II*. Wiley (1987).
- [79] P. E. M. Siegbahn. In B. O. Roos, Herausgeber, *Lecture Notes in Quantum Chemistry*. Springer, Berlin (1992).
- [80] A. Szabo und N. S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Macmillan Publishing Co., Inc., New York (1982).
- [81] C. C. J. Roothan. *Rev. Mod. Phys.* **23**, 69 (1951).
- [82] P. O. Löwdin. *J. Chem. Phys.* **18**, 365 (1950).
- [83] H.-J. Werner und P. J. Knowles. *J. Chem. Phys.* **89**, 5803 (1988).
- [84] P. J. Knowles und H.-J. Werner. *Chem. Phys. Letters* **145**, 514 (1988).
- [85] C. Hampel, K. Peterson und H.-J. Werner. *Chem. Phys. Letters* **190**, 1 (1992).
- [86] P. O. Löwdin. *Phys. Rev.* **97**, 1474 (1955).
- [87] J. Paldus. In H. Eyring und D. G. Henderson, Herausgeber, *Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives*, Band 2. Academic Press, New York (1976).
- [88] MOLCAS Version 4. K. Andersson, M. R. Blomberg, M. P. Fülcher, G. Karlström, R. Lindh, P.-Å. Malmqvist, P. Neogrady, J. Olsen, B. O. Roos, A. J. Sadlej, M. Schütz, L. Seijo, L. Serrano-Andres, P. E. M. Siegbahn and P.-O. Widmark, Lund University, Sweden (1997).
- [89] K. Andersson, P.-Å. Malmqvist, B. O. Roos, A. J. Sadlej und K. Wolinski. *J. Phys. Chem.* **94**, 5483 (1990).
- [90] Basis sets were obtained from the Extensible Computational Chemistry Environment Basis Set Database, Version 1.0, as developed and distributed by the Molecular Science Computing Facility, Environmental and Molecular Sciences Laboratory which is part of the Pacific Northwest Laboratory, P.O. Box 999, Richland, Washington 99352, USA, and funded by the U.S. Department of

- Energy. The Pacific Northwest Laboratory is a multi-program laboratory operated by Battelle Memorial Institute for the U.S. Department of Energy under contract DE-AC06-76RLO 1830. Contact David Feller, Karen Schuchardt, or Don Jones for further information.
- [91] <http://www.emsl.pnl.gov:2080/forms/basisform.html>.
- [92] T. H. Dunning, Jr. *J. Chem. Phys.* **55**, 716 (1971).
- [93] T. Dunning und P. Hay. In H. F. Schaefer III, Herausgeber, *Modern Theoretical Chemistry*, Band 3. Plenum Press, New York (1977).
- [94] T. H. Dunning, Jr. *J. Chem. Phys.* **53**, 2823 (1970).
- [95] G. E. McGraw, D. L. Bernitt und I. C. Hisatsune. *J. Chem. Phys.* **42**, 237 (1965).
- [96] GAUSSIAN 94, Revision D.4, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, T. Keith, J. A. Peterson, J. A. Montgomery, K. Raghavachari, M. A. Al-Laham, V. G. Zakrzewski, J. V. Ortiz, J. B. Foresman, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, A. Nanayakkara, M. Challacombe, C. Y. Peng, P. Y. Ayala, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, E. S. Replogle, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, J. S. Binkley, D. J. Defrees, J. Baker, J. P. Stewart, M. Head-Gordon, C. Gonzalez, J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1995.
- [97] L. R. Maxwell und V. M. Moseley. *J. Chem. Phys.* **8**, 738 (1940).
- [98] D. R. Lide und H. P. R. Frederikse, Herausgeber. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press, Boca Raton, 75. Auflage (1994).
- [99] L. E. Harris. *J. Chem. Phys.* **58**, 5615 (1973).
- [100] MOLPRO is a package of ab initio programs written by H.-J. Werner and P. J. Knowles, with contributions from J. Almlöf, R. D. Amos, A. Berning, M. J. O. Deegan, F. Eckert, S. T. Elbert, C. Hampel, R. Lindh, W. Meyer, A. Nicklass, K. Peterson, R. Pitzer, A. J. Stone, P. R. Taylor, M. E. Mura, P. Pulay, M. Schuetz, H. Stoll, T. Thorsteinsson, and D. L. Cooper.
- [101] R. Meyer. *J. Chem. Phys.* **52**, 2053 (1970).
- [102] C. C. Marston und G. G. Balint-Kurti. *J. Chem. Phys.* **91**, 3571 (1989).
- [103] J. V. Lill, G. A. Parker und J. C. Light. *Chem. Phys. Letters* **89**, 483 (1982).

- [104] R. Kosloff und H. Tal-Ezer. *Chem. Phys. Letters* **127**, 223 (1986).
- [105] C. Leforestier, R. H. Bisseling, C. Cerjan, M. D. Feit, R. Friesner, A. Guldberg, A. Hammerich, G. Jolicard, W. Karrlein, H.-D. Meyer, N. Lipkin, O. Roncero und R. Kosloff. *J. Comput. Phys.* **94**, 59 (1991).
- [106] T. N. Truong, J. J. Tanner, P. Bala, J. A. McCammon, B. Lesyng und D. K. Hoffman. *J. Chem. Phys.* **96**, 2077 (1992).
- [107] R. Kosloff und D. Kosloff. *J. Chem. Phys.* **79**, 1823 (1983).
- [108] J. Alvarillos und H. Metiu. *J. Chem. Phys.* **88**, 4957 (1988).
- [109] A. D. Bandrauk und H. Shen. *Can. J. Chem.* **70**, 555 (1992).
- [110] A. D. Bandrauk und H. Shen. *J. Chem. Phys.* **99**, 1185 (1993).
- [111] M. D. Feit und J. A. Fleck Jr. *J. Chem. Phys.* **78**, 301 (1983).
- [112] J. W. Cooley und J. W. Tukey. *Math. Comput.* **19**, 297 (1965).
- [113] M. Oppel und G. K. Paramonov. *Chem. Phys.* (1998). Im Druck.
- [114] U. Banin, A. Bartana, S. Ruhman und R. Kosloff. *J. Chem. Phys.* **101**, 8461 (1994).
- [115] A. Bartana, U. Banin, S. Ruhman und R. Kosloff. *Chem. Phys. Letters* **229**, 211 (1994).
- [116] P. Dietrich und P. B. Corkum. *J. Chem. Phys.* **97**, 3187 (1992).
- [117] J. Manz, M. Oppel und G. K. Paramonov. *J. Phys. Chem. A* (1998). Im Druck.
- [118] T. S. Rose, M. J. Rosker und A. H. Zewail. *J. Chem. Phys.* **88**, 6627 (1988).
- [119] D. M. Neumark. *Acc. Chem. Res.* **26**, 33 (1992).
- [120] J. R. Huber und R. Schinke. *J. Phys. Chem.* **97**, 3463 (1993).
- [121] R. H. Bisseling, R. Kosloff und J. Manz. *J. Chem. Phys.* **83**, 993 (1985).
- [122] R. H. Bisseling, R. Kosloff, J. Manz und H. H. R. Schor. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **89**, 270 (1985).
- [123] M. V. Korolkov und G. K. Paramonov. *Phys. Rev. A* **56**, 1 (1997).