

## Angewandte Berichtigung



Ultrafast Energy Transfer to Liquid Water by Sub-Picosecond High-Intensity Terahertz Pulses: An Ab Initio Molecular Dynamics Study

P. K. Mishra, O. Vendrell,\*  
R. Santra \_\_\_\_\_ **13930–13932**

*Angew. Chem.* **2013**, *125*

DOI: 10.1002/ange.201305991

Die Anwendung eines externen elektrischen Felds bei den in dieser Zuschrift beschriebenen Berechnungen beruhte auf dem gewöhnlichen „Position-Gauge“-Formalismus, der nur für nichtperiodische Systeme geeignet ist. Im vorliegenden Fall ergeben sich zu hohe Werte für den Energietransfer vom elektrischen Feld auf die Flüssigkeit bei allen Feldintensitäten.

Dieses Problem wurde durch Anwendung des korrekten Berry-Phasenformalismus für elektrische Felder mit periodischen Randbedingungen gelöst, wie in dem Programm CP2K implementiert. Der Temperatursprung erfolgt nun bei einer Intensität von  $5 \times 10^{12}$  W cm $^{-2}$  anstelle von  $10^{10}$  W cm $^{-2}$ , wie in der Zuschrift angegeben. Da bei dieser Intensität während des Pulses keine Ionisierung auftritt, hat dies keine Auswirkungen auf die Schlussfolgerungen.

Mit dieser Berichtigung verknüpft sind Hintergrundinformationen, die neue Versionen der Abbildungen 1 und 3 mit korrekten mittleren Energien sowie entsprechende Verteilungen der Wassermonomere und radiale Verteilungsfunktionen enthalten.

Die Autoren entschuldigen sich für diesen Fehler, der an den wichtigsten Schlussfolgerungen der Arbeit nichts ändert.