TDK téma összefoglaló / Research summary (see below in English)

Írta: Szidarovszky Tamás tamas.janos.szidarovszky@ttk.elte.hu

Az érdeklődő hallgatók további tudnivalók, szakirodalmi cikkek, stb. kapcsán keressenek bátran. Interested students can feel free to contact me for further details, papers to read, etc.

Molekulák nagyintenzitású lézerterekben

A kutatás kapcsán három alfejezeten lehet dolgozni. (1) Molekuláris ionizációs modellek fejlesztése erős lézerterek esetére. A ma aktívan fejlődő, kurrens attofizika és attokémia szempontjából is releváns kutatás célkitűzése nagyintenzitású terekben érvényes, molekulákra is alkalmazható, hatékony ionizációs modellek kidolgozása és/vagy implementációja, numerikus alkalmazása. Külön fejezet a Frank-Condon elvtől való eltérés nagy intenzitású terekben, azaz a keletkező kationok rezgési-forgási állapoteloszlásának számítása. (2) Molekulákforgások kvantumdinamikája lézerterekben. A kutatási téma célja különböző molekulatípusok (pörgettyűk) lézerindukált forgási dinamikájának (makroszkópikus orientációjának) elméleti vizsgálata, különböző molekulamodellek és kvantumkémiai módszerek tesztelése, esetleg molekulák laza szerkezetének és a rezgési-forgási csatolásnak a térbeli irányítottságra és orientációra tett hatásának vizsgálata. (3) Fényöltöztetett molekulák spektroszkópiája. Az erős lézerfénnyel való kölcsönhatás miatt a molekulák állapota megváltozik, a hullámfüggvény különböző sajátállapotok Ez spektroszkópiával keveréke lesz. molekulatulajdonságok, illetve a hagyományos spektroszkópiában megszokott kiválasztási szabályok megváltozásához vezet. A kutatás célja lézerfénnyel öltöztetett molekulák spektrumának számítása és értelmezése, új mérési eljárások keresése hagyományosan tiltott átmenetek meghatározására, stb.

Molecules in strong laser fields

This research topic includes three possible projects. (1) Developing molecular ionization models for strong fields. The aim of this research, which is relevant for the rapidly developing fields of attophysics and attochemistry, is to develop, implement and apply ionization models suitable for molecules in high-intensity laser fields. A related issue is investigating the breakdown of the Frank-Condon principle in strong fields, i.e., determining the distribution of rovibrational states after ionization. (2) Quantum dynamics of molecular rotations in laser fields. The aim of this research is to investigate the laser-induced rotational dynamics (macroscopic alignment and orientation) of different types of molecules (tops), using various molecular models and quantum chemistry methods. The effects of molecular floppyness on the rotational dynamics in the case of weakly-bound complexes can also be explored. (3) Spectroscopy of light-dressed molecules. The structural, optical, and chemical properties of molecules can be changed when interacting with strong laser fields. This can also influence the molecular properties probed by spectroscopy, for example, by changing the usual optical selection rules. The aim of this project is to compute the light-dressed spectra of various molecular species, and explore new possibilities in measuring classically forbidden transitions, laser-induced dynamical control etc.