

Starkfeldeffekte in Benzolverbindungen: Der Einfluss von Substituenten auf die harmonischen Erzeugung.

Betreuungsperson: Samuel Schöpa

Bachelorprojekt in Deutsch oder Englisch. Möglich auch als Masterprojekt.

Benzol, das einfachste aromatische Molekül, ist aufgrund seiner besonderen geometrischen und elektronischen Eigenschaften ein beliebtes Ziel, um die Interaktion von Molekülen mit einem starkem Laserfeld zu simulieren [1, 2, 3]. Die Elektronen werden dabei durch das externe Potential beschleunigt und strahlen dabei in einem Prozess, der hohen Harmonischen Erzeugung genannt wird, Photonen mit einer Vielfachen der Laserfrequenz ab. In Benzol sorgen dabei dessen delokalisierte π -Elektronen in einem zirkularem Feld für ein besonders starkes Harmonischensignal mit distinkten Auswahlregeln durch Benzols Rotationsymmetrie [3], welche in Abbildung 1. zu sehen sind.

In diesem Projekt wird untersucht wie sich das Spektrum der Harmonischen verändert, wenn ein einzelnes Wasserstoffatom durch ein anderes Atom oder Molekül ersetzt wird, wie in den Benzolderivaten aus Abbildung 2. Wie anfällig sind die Auswahlregeln gegenüber kleinen Symmetriestörungen und wie wirken sich die Substituenten auf die Intensität und Polarisation der Harmonischen aus?

Um diese Fragen zu beantworten werden als erstes Grundzustandsdichtefunktionaltheorieberechnungen (DFT) durchgeführt um die korrekte Geometrie und elektronische Struktur für ausgewählte Benzolderivate zu erhalten. Mit diesen werden dann Zeitabhängige Simulationen (TD-DFT) gestartet, in welchen die Elektronen zeitentwickelt in einem starkem Laserfeld propagiert werden. Dies kann entweder selbstständig numerisch implementiert werden, oder es wird ein von uns bereitgestellter Code benutzt.

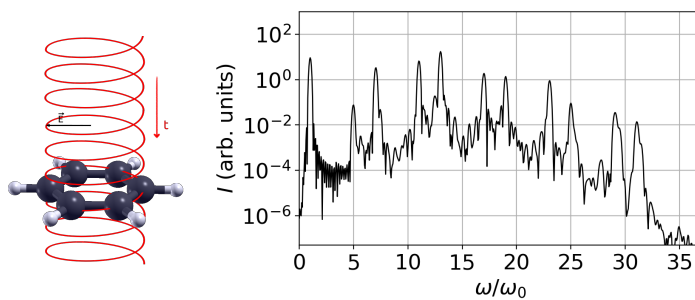


Abbildung 1: Ein Benzolmolekül welches einem starkem und zirkular polarisiertem Laserfeld ausgesetzt ist zeigt nur Peaks bei $6n \pm 1$ mal der Laserphotonenenergie in seinem Spektrum. Die Ursache dieser Auswahlregel liegt in der besonderen Rotationsymmetrie von Benzol.

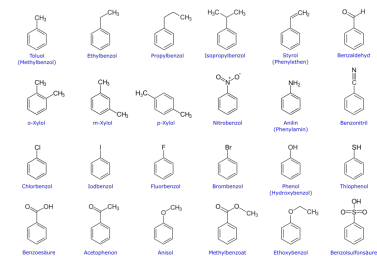


Abbildung 2: Einige Benzolderivate, in welchen ein Wasserstoffatom durch verschiedene andere Atome oder Moleküle substituiert wurde. Image by Johannes Schneider (2015) released under the CC BY-SA 4.0 license.

- [1] A. Wardlow, D. Dundas, Phys. Rev. A **93**, 023428 (2016).
- [2] S. Zhou et al., Chem. Phys. **545**, 111147 (2021).
- [3] F. Ceccherini, D. Bauer, Phys. Rev. A **64**, 033423 (2001).