

ĐÓNG GÓP CỦA CÁC LỚP VÂN ĐẠO PHÂN TỬ TRONG QUÁ TRÌNH ION HÓA VÀ PHÁT XẠ SÓNG HÀI BẬC CAO CỦA N₂ VÀ CO₂

HOÀNG VĂN HƯNG*, NGUYỄN NGỌC TY**

TÓM TẮT

Sử dụng gần đúng trường mạnh và mô hình ba bước, chúng tôi tính toán tốc độ ion hóa và sóng hài phát ra do tương tác của chùm lade với hai lớp điện tử ngoài cùng HOMO và HOMO-1 của phân tử N₂ và CO₂. Kết quả cho thấy, với các góc định phương nhỏ thì sự đóng góp của lớp điện tử HOMO-1 là không đáng kể so với lớp điện tử HOMO trong cả tốc độ ion hóa và sóng hài bậc cao. Tuy nhiên, đối với các trường hợp góc định phương lớn, đóng góp lớp điện tử bên trong là đáng kể.

Từ khóa: ion hóa, sóng hài bậc cao, vân đạo phân tử, lade xung cực ngắn.

ABSTRACT

Contribution of molecular orbitals to ionization process and high-order harmonic generation of N₂ and CO₂

Using strong field approximation and the three-step model, we calculate ionization rate and high-order harmonic generating from the interaction of laser beams with the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the second least bound orbital (HOMO-1) of N₂ and CO₂. The results show that with small value of alignment, the contribution of HOMO-1 to ionization rate and high-order harmonic generation can be negligible, compared to the one of HOMO. However, in the case of larger alignment angles, the contribution of HOMO-1 to ionization rate and high-order harmonic generation is significant.

Keywords: ionization, high-order harmonic generation, molecular orbitals, ultra-short laser pulse.

1. Giới thiệu

Tương tác giữa nguyên tử, phân tử với các chùm lade là một bài toán được quan tâm rộng rãi trong cộng đồng khoa học vì nó mở ra nhiều cơ hội tiếp cận với thế giới vi mô. Cùng với sự phát triển của khoa học kỹ thuật, các nguồn lade có cường độ cỡ 10^{14} W/cm², xung ngắn femto giây (fs) và atto giây (as) đã được chế tạo. Chính sự ra đời của các nguồn lade trên đã thúc đẩy các phương pháp

thu nhận thông tin cấu trúc động của phân tử với độ phân giải thời gian ở cấp độ femto, atto giây theo các cơ chế khác nhau. Một trong những cơ chế được sử dụng gần đây là quá trình phát sóng thứ cấp do tương tác giữa phân tử với chùm lade cực mạnh, chúng tôi gọi là sóng hài bậc cao (viết tắt HHG của cụm từ High-order Harmonic Generation) [2].

Trong công trình [5], nhóm các nhà khoa học Canada khẳng định rằng đã chụp được ảnh đám mây điện tử ngoài cùng (HOMO) của phân tử N₂ bằng

* CN, Trường Đại học Sư phạm TP HCM

** TS, Trường Đại học Sư phạm TP HCM

nguồn lade có độ dài xung 30 fs, cường độ 2.10^{14} W/cm² theo cơ chế HHG. Sự thành công của phương pháp chụp ảnh phân tử trong công trình [5] đã thu hút sự quan tâm rất lớn của các nhà khoa học [6, 7, 8, 13]. Trong công trình [6], các tác giả chỉ ra rằng chất lượng chụp ảnh HOMO của N₂ có thể cải thiện bằng cách sử dụng lade bước sóng dài, chẳng hạn như 1200nm thay vì 800 nm. Các tác giả cũng đã kiểm chứng kết luận này khi áp dụng phương pháp chụp ảnh cho phân tử CO₂ [7]. Trong công trình [7], ngoài hình ảnh về lớp điện tử ngoài cùng (HOMO), các tác giả còn thu nhận được thông tin khoảng cách liên hạt nhân của các phân tử N₂, O₂, CO₂ bằng phương pháp so sánh phù hợp từ nguồn HHG. Các tác giả cũng đã phát triển phương pháp này và áp dụng thành công cho các phân tử phức tạp hơn, có hai thông tin cấu trúc như OCS, BrCN và O₃ [10]. Theo đó, với nguồn HHG phát ra từ phân tử, các tác giả đã trích xuất được thông tin khoảng cách liên hạt nhân cho các phân tử OCS, BrCN, O₃ với độ chính xác cao, sai số dưới 5%. Ngoài ra, trong công trình [11], các tác giả đã khẳng định có thể theo dõi dấu vết của quá trình đồng phân hóa dựa vào đặc điểm HHG đạt cực đại tại các trạng thái cân bằng khi quá trình này đang diễn ra. Đây là một kết luận quan trọng và cần được kiểm chứng cho nhiều quá trình đồng phân hóa với các phân tử khác nhau để khẳng định tính phổ quát của phương pháp.

Cho đến những năm gần đây việc giải thích sự hình thành phổ HHG vẫn thường được hiểu theo mô hình ba bước.

Trước hết điện tử ion hóa xuyên hầm ra vùng liên tục, sau đó được gia tốc bởi trường lade và cuối cùng tái kết hợp lại với ion mẹ và phát ra photon [9]. Một điều đặc biệt trong mô hình này là chỉ xét đến sự đóng góp duy nhất của một lớp điện tử HOMO mà không tính đến lớp điện tử khác. Gần đây, trong công trình [4] bằng quá trình chụp ảnh cắt lớp phân tử, các nhà khoa học đã tái tạo không chỉ lớp HOMO mà còn cả lớp điện tử kế cận phía trong (HOMO-1) từ dữ liệu HHG phát ra từ khí N₂ tương tác với lade xung atto giây. Đây là một trong những dấu hiệu quan trọng cho thấy cần phải xét đến đóng góp của các lớp điện tử bên trong khi nghiên cứu tương tác giữa phân tử với lade mà đặc biệt là quá trình phát HHG.

Trong bài báo này, với mục tiêu so sánh sự đóng góp của các lớp điện tử trong quá trình ion hóa và phát HHG của N₂ và CO₂, chúng tôi giới hạn chỉ xét đến hai lớp HOMO và HOMO-1 trong quá trình tương tác với lade của phân tử. Khi phân tử, nguyên tử tương tác với trường ngoài, một trong những quá trình thường xuyên xảy ra là ion hóa. Việc tính tốc độ ion hóa có ý nghĩa quan trọng bởi vì đại lượng này không những cho chúng ta biết số ion được sinh ra trong đơn vị thời gian mà còn cung cấp một cách khái quát về tương tác giữa phân tử, nguyên tử với trường ngoài. Bên cạnh đó, quá trình phát HHG là một trong những khả năng có thể xảy ra tiếp theo sau quá trình ion hóa nên việc nghiên cứu HHG thường liên quan chặt chẽ tới khả năng ion hóa của phân tử, nguyên tử. Chính vì vậy, chúng tôi kết hợp tính toán hai đại lượng vừa nêu trong

công trình này. Chúng tôi sẽ tính tốc độ ion hóa cho từng lớp điện tử độc lập để đánh giá mối tương quan về sự đóng góp của từng lớp điện tử trong quá trình này. Sau đó, chúng tôi mô phỏng HHG phát ra do điện tử của từng lớp bị ion hóa và quay về kết hợp phát ra photon. So sánh tín hiệu HHG của từng lớp điện tử cho phép chúng ta kết luận về sự đóng góp của các lớp điện tử trong quá trình phát xạ này.

2. Mô hình tính toán HHG

Trên nguyên tắc, chúng ta có thể tính HHG bằng việc giải chính xác phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian của nguyên tử, phân tử trong trường lade. Hiện nay, có nhiều nhóm nghiên cứu theo hướng này và đã thu được nhiều kết quả đáng chú ý [1, 12]. Tuy nhiên, do nguyên tử, phân tử là hệ nhiều hạt phức tạp tương tác với trường lade nên việc giải chính xác phương trình Schrödinger để thu được phổ HHG đòi hỏi rất nhiều tài nguyên máy tính. Chính vì vậy, theo hướng nghiên cứu này, hiện nay các nhóm chỉ tập trung giải quyết được cho nguyên tử hay phân tử đơn giản chỉ chứa một hay hai điện tử như H, H_2^+ , H_2 . Chính nhu cầu tính toán phổ HHG cho các phân tử phức tạp hơn đòi hỏi xây dựng các mô hình tính toán gần đúng khi nghiên cứu quá trình này.

Trong công trình này, chúng tôi mô phỏng HHG phát ra do tương tác giữa phân tử và chùm lade với gần đúng trường mạnh theo mô hình ba bước của nhà khoa học Lewenstein [9]. Mô hình này chính là sự cụ thể hóa bằng việc giải gần đúng phương trình Schrödinger phụ

thuộc thời gian kết hợp với gần đúng trường mạnh và cả phân tử được xem như chỉ có một điện tử chịu tác dụng của lade. HHG tính theo mô hình này cho thấy các đặc trưng đã được thực nghiệm xác nhận: cường độ giảm ở những tần số thấp, tiếp theo sau là một miền phẳng mà cường độ gần như không đổi, miền phẳng kết thúc ở một điểm dừng có vị trí $I_p + 3.17U_p$, trong đó: I_p chính là thế ion hóa của

nguyên tử hay phân tử, $U_p = \frac{E^2}{4w^2}$

($U_p = E^2/4w^2$) chính là động năng trung bình của điện tử trong trường lade có cường độ điện trường E , tần số góc.

Để tính toán phổ HHG do lade tương tác với phân tử, chúng tôi cần chuẩn bị thông tin về phân tử của N_2 và CO_2 . Cụ thể, để có được phổ HHG, chúng ta cần biết cấu hình phân tử để có thể tính được hàm sóng của các lớp điện tử. Hàm sóng khi chưa có lade này sẽ được sử dụng để giải gần đúng phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian, từ đó tính ra phổ HHG. Cả N_2 và CO_2 đều là phân tử thẳng có các khoảng cách liên nguyên tử lần lượt bằng $R_{NN}=1.11 \text{ \AA}$ và $R_{CO}=1.17 \text{ \AA}$. Đây là các số liệu thu được từ tính toán sử dụng phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT) thông qua phần mềm Gaussian [3]. Các số liệu thu được phù hợp với các giá trị đo đạc bằng thực nghiệm. Từ các cấu hình này, các phân tử sẽ tương tác với chùm lade cường độ 2.10^{14} W/cm^2 , độ dài xung 30 fs và bước sóng 800 nm hoặc 1200 nm.

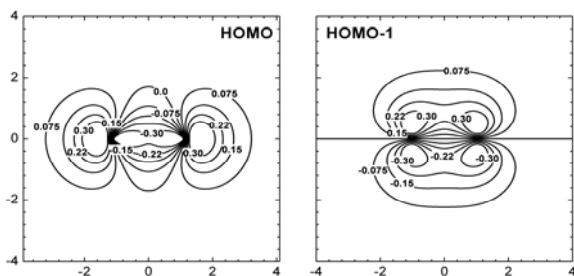
Các phân tử khí được xem như được định phương theo trục phân tử. Sau

đó chiếu chùm lade vào các phân tử khí đã được định phương để nghiên cứu quá trình ion hóa hoặc phát HHG. Chúng tôi sẽ khảo sát sự phụ thuộc của tốc độ ion hóa và cường độ HHG vào góc định phương θ , là góc hợp bởi trục phân tử và vector phân cực của chùm lade.

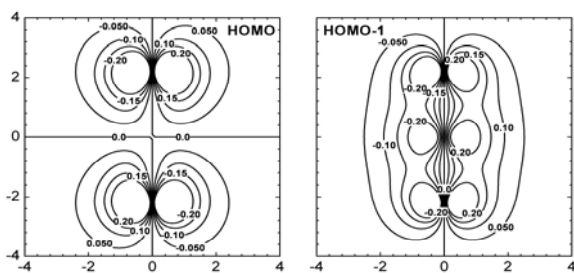
3. Kết quả

3.1. Mô phỏng HOMO và HOMO-1 của phân tử

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả về hàm sóng của hai lớp điện tử HOMO và HOMO-1 của các phân tử để chuẩn bị tính tốc độ ion hóa và HHG. Như đã trình bày, chúng tôi sử dụng chương trình Gaussian để tính hàm sóng của các lớp điện tử với phương pháp DFT, hiệu chỉnh B3LYP và hệ hàm cơ sở 6-31G+(d,p). Kết quả cho thấy, HOMO và HOMO-1 của các phân tử thu được phù hợp với các kết quả đã biết về đối xứng của các lớp vân đạo phân tử.



Hình 1. HOMO và HOMO-1 của phân tử N_2



Hình 2. HOMO và HOMO-1 của phân tử CO_2

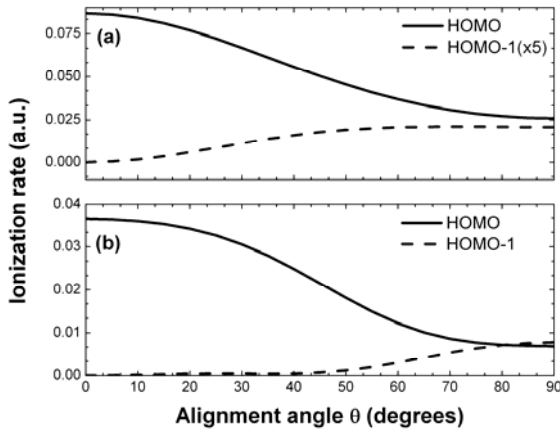
Theo hình 1, ta nhận thấy phân tử N_2 có HOMO đối xứng s_g và HOMO-1 có đối xứng p_u . Kết quả tính toán cho thấy thế ion hóa của hai lớp điện tử này lần lượt là 15.6 eV và 17.2 eV. Tương tự, trong hình 2, đối với phân tử CO_2 , HOMO có đối xứng p_g và HOMO-1 có đối xứng p_u . Thế ion hóa lần lượt là 13.8 eV và 17.6 eV. Ta thấy rằng thế ion hóa điện tử từ lớp HOMO-1 luôn lớn hơn thế ion hóa của lớp HOMO. Điều này hoàn toàn phù hợp vì lớp điện tử bên ngoài do liên kết với hạt nhân kém hơn, có năng lượng liên kết thấp hơn nên thế ion hóa sẽ thấp hơn.

3.2. Tốc độ ion hóa

Trong các bài toán tương tác giữa lade và nguyên tử, phân tử, quá trình ion hóa là một trong những quá trình thường xuyên xảy ra và được quan tâm. Chính vì vậy, việc tính toán tốc độ ion hóa có ý nghĩa quan trọng. Tốc độ ion hóa được định nghĩa là số nguyên tử, phân tử bị ion hóa trong một đơn vị thời gian. Trong phần này, chúng tôi tính đại lượng này với gần đúng trường mạnh cho hai lớp điện tử HOMO và HOMO-1 với các góc định phương thay đổi từ 0° đến 90° . Nguồn lade sử dụng để ion hóa có cường độ 2.10^{14} W/cm^2 với độ dài xung 30 fs, bước sóng 800 nm hoặc 1200 nm.

Đối với phân tử N_2 , chúng tôi nhận thấy tốc độ ion hóa điện tử từ HOMO đạt giá trị lớn nhất khi phân tử được định phương song song với vector phân cực của lade, góc định phương θ bằng 0° . Ngược lại, điện tử từ lớp HOMO-1 khi được ion hóa sẽ có giá trị cực đại khi phân tử định phương vuông góc, tức góc

θ bằng 90° . Điều này được giải thích là do sự khác nhau trong đối xứng của hai lớp điện tử. Đối với lớp điện tử có đối xứng s_g quá trình ion sẽ xảy ra mạnh nhất khi chùm lade phân cực song song với trục phân tử trong khi đó đối với lớp điện tử đối xứng p_u việc ion hóa điện tử sẽ lớn nhất khi vectơ phân cực của lade vuông góc với trục phân tử. Tốc độ ion hóa của hai lớp điện tử của N_2 được vẽ trong hình 3.



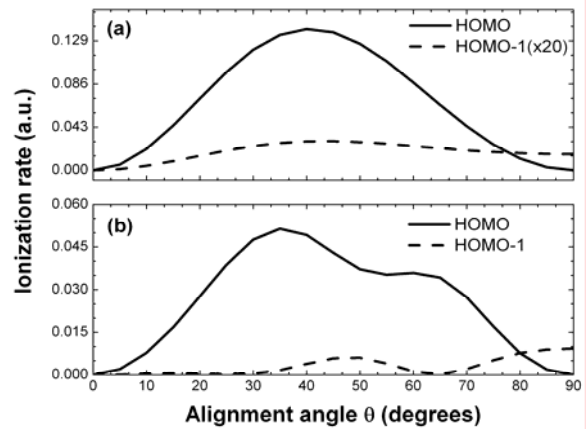
Hình 3. Tốc độ ion hóa của phân tử từ HOMO và HOMO-1 của phân tử N_2 với (a) lade 800 nm; (b) lade 1200 nm

Hình 3a chúng ta có thể thấy, đối với chùm lade có bước sóng 800 nm, tốc độ ion hóa của lớp điện tử HOMO lớn hơn rất nhiều so với đại lượng này tính cho lớp HOMO-1. Cụ thể, tốc độ ion hóa điện tử lớp HOMO lớn hơn 5 lần so với lớp HOMO-1 khi góc định phương đạt giá trị 90° . Ứng với các góc định phương khác, tỉ số này càng lớn hơn. Do đó có thể thấy đóng góp của HOMO-1 trong trường hợp này là không đáng kể.

Tuy nhiên, đối với chùm lade có bước sóng 1200 nm, đóng góp của HOMO-1 trong quá trình ion hóa cần được xét đến. Theo hình 3b, ứng với các góc

định phương nhỏ hơn 50° , tốc độ ion hóa điện tử lớp HOMO-1 rất nhỏ so với đại lượng này tính cho lớp HOMO. Khi góc định phương tăng từ 50° đến 90° , tốc độ ion hóa của lớp HOMO-1 cũng tăng theo và gần bằng với tốc độ ion hóa từ HOMO ứng với góc định phương bằng 90° .

Chúng tôi tiếp tục tính tốc độ ion hóa từ hai lớp điện tử cho phân tử CO_2 . Đối với phân tử CO_2 , HOMO có đối xứng p_g và tốc độ ion hóa từ lớp điện tử này đạt giá trị lớn nhất khi góc định phương khoảng 40° đến 45° . Lớp điện tử HOMO-1 có đối xứng p_u nên tốc độ ion cực đại ứng với góc định phương 90° . Giống như trường hợp phân tử N_2 , khi ion hóa phân tử CO_2 bằng chùm lade bước sóng 800 nm, tốc độ ion hóa từ lớp HOMO-1 rất nhỏ so với lớp HOMO. Tuy nhiên khi tăng bước sóng lên 1200 nm, theo hình 4b, tốc độ ion hóa của lớp HOMO-1 đáng kể so với tốc độ từ lớp HOMO với ứng các góc định phương lớn như 80° - 90° .



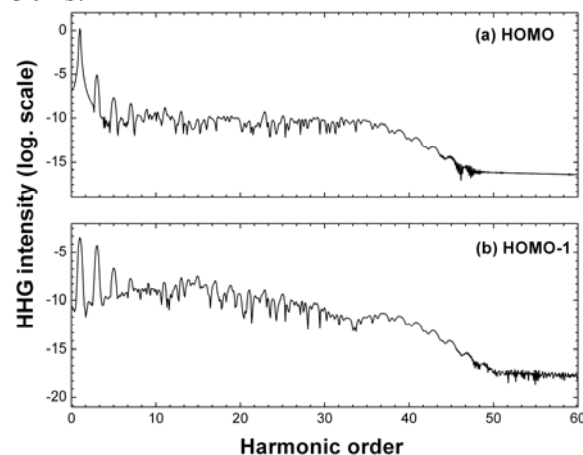
Hình 4. Tốc độ ion hóa của phân tử từ HOMO và HOMO-1 của phân tử CO_2 với (a) lade 800 nm; (b) lade 1200 nm

Cả hai trường hợp trên cho chúng ta thấy rằng, trong quá trình ion hóa phân tử N₂ và CO₂ bằng các nguồn lade, đóng góp của HOMO-1 là không đáng kể ứng với trường hợp bước sóng ngắn 800 nm. Tuy nhiên, với trường hợp bước sóng dài, ví dụ 1200 nm, đóng góp của HOMO-1 cần được tính đến, đặc biệt ứng với các góc định phương lớn, 50⁰ đến 90⁰ đối với N₂ và 80⁰ đến 90⁰ đối với CO₂.

3.3. HHG của HOMO và HOMO-1

Với mô hình tính toán như đã trình bày trong phần 2, chúng tôi tiến hành khảo sát HHG phát ra từ các lớp điện tử HOMO và HOMO-1 của N₂ và CO₂. Đối với cả hai lớp điện tử, sau khi tính được HHG chúng tôi thấy rằng phổ HHG có những đặc trưng đã được mô tả: cường độ HHG giảm ở những tần số nhỏ, tiếp theo là một miền phẳng với cường độ HHG gần như không thay đổi, miền phẳng này kết thúc ở một điểm dừng, sau điểm này HHG giảm mạnh và có cường độ không đáng kể. Vị trí của điểm dừng phụ thuộc vào thể ion hóa của phân tử và các thông số của chùm lade theo biểu thức $I_p + 3.17U_p$. Trong hình 5, chúng tôi vẽ một trường hợp cụ thể về phổ HHG phát ra từ hai lớp điện tử của phân tử N₂ ứng với góc định phương 45⁰ để kiểm chứng công thức tính vị trí điểm

dừng này. Lade có bước sóng 800 nm, cường độ 2.10^{14} W/cm² với độ dài xung 30 fs.



Hình 5. HHG từ (a) HOMO và (b) HOMO-1 của N₂ ứng với góc định phương $\theta = 45^0$

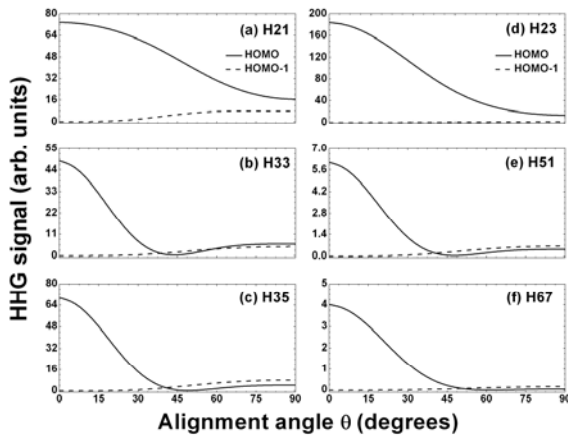
Sử dụng công thức tính điểm dừng, đối với phân tử N₂, miền phẳng sẽ kết thúc tại bậc 37 khi lade có bước sóng 800nm tương tác với điện tử lớp HOMO. Kết quả mô phỏng trong hình 5a cho thấy vị trí điểm dừng từ phổ HHG mô phỏng phù hợp với công thức vừa trình bày. Kết quả về vị trí điểm dừng của HHG khi tương tác với HOMO-1 của N₂, bậc 39, cũng được nhìn thấy rõ trong hình 5b. Vị trí điểm dừng cho các lớp điện tử của hai phân tử khi tương tác các nguồn lade có bước sóng khác nhau được chúng tôi thể hiện trong bảng 1.

Bảng 1. Các tần số của điểm dừng của HHG cho hai phân tử CO₂ và N₂

Phân tử	Orbital	800 nm	1200 nm
CO ₂	HOMO	35	97
	HOMO-1	37	101
N ₂	HOMO	37	99
	HOMO-1	39	101

Để so sánh HHG phát ra từ các lớp điện tử HOMO và HOMO-1 của hai phân tử, chúng tôi tiến hành tính cường độ phát xạ này ứng với các góc định phương từ 0° đến 90° .

Đối với phân tử N_2 , HHG phát ra do điện tử lớp HOMO có giá trị lớn nhất khi góc định phương bằng 0° trong khi đó HHG của lớp HOMO-1 lớn nhất khi θ bằng 90° . Với nguồn lade có bước sóng 800 nm, kết quả cho thấy HHG phát ra từ HOMO-1 chỉ có thể so sánh với HHG phát ra từ HOMO khi góc định phương lớn hơn 40° . Đối với bậc 21, cường độ HHG từ HOMO-1 còn khá nhỏ so với HHG của lớp HOMO. Tuy nhiên, với bậc 33 và 35, HHG từ HOMO-1 bằng và thậm chí lớn hơn HHG từ HOMO của N_2 . Kết quả tương tự cũng được kiểm chứng cho nguồn lade có bước sóng 1200 nm, được thể hiện như trong hình 6.

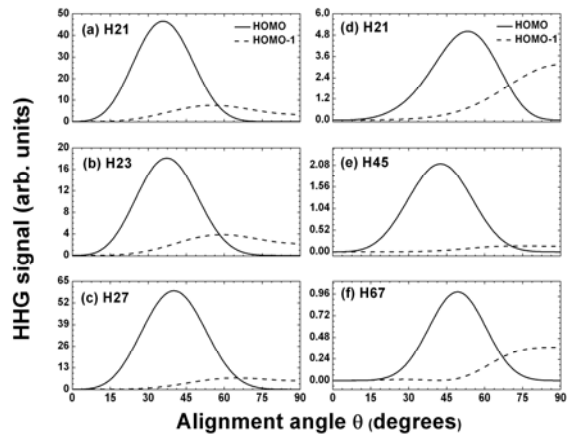


Hình 6. HHG từ HOMO và HOMO-1 của phân tử N_2 (a), (b), (c) với lade 800 nm; (d), (e), (f) với lade 1200 nm

Với kết quả này, chúng ta thấy rằng khi tính HHG cho phân tử N_2 đóng góp của HOMO-1 cần được tính đến, đặc biệt

là ứng với các góc định phương lớn hơn 40° .

Chúng tôi tiếp tục so sánh HHG phát ra từ hai lớp điện tử HOMO và HOMO-1 của phân tử CO_2 . Đối với phân tử CO_2 , khi thay đổi góc định phương kết quả cho thấy HHG từ HOMO đạt cực đại khi θ khoảng 45° trong khi đó HHG của HOMO-1 lớn nhất với θ bằng 90° .



Hình 7. HHG từ HOMO và HOMO-1 của phân tử CO_2 (a), (b), (c) với lade 800 nm; (d), (e), (f) với lade 1200 nm

Kết quả được trình bày trong hình 7 cho thấy rằng, HHG phát ra từ HOMO-1 của CO_2 chỉ có cường độ đáng kể so với HHG từ HOMO ứng với các góc định phương từ 60° trở đi cho cả hai trường hợp của bước sóng 800 nm và 1200 nm. Đặc biệt, với trường hợp lade 1200 nm, tại những góc định phương lớn từ 75° đến 90° cường độ HHG phát ra từ HOMO-1 còn lớn hơn cả HHG của HOMO.

Kết hợp hai trường hợp N_2 và CO_2 chúng ta có thể nhận thấy, khi tính HHG cho hai phân tử này, ứng với các góc định phương nhỏ đóng góp của HOMO-1 là không đáng kể, có thể bỏ qua. Tuy nhiên, ứng với các góc định phương lớn từ 40° đối với N_2 và từ 60° đối với CO_2 , HHG

phát ra từ điện tử của HOMO-1 có cường độ đáng kể và cần được tính đến khi khảo sát quá trình phát HHG của phân tử.

4. Kết luận

Như vậy, bằng cách sử dụng gần đúng trường mạnh để tính tốc độ ion hóa và mô hình ba bước Lewenstein để mô phỏng phổ HHG thu được từ hai lớp điện tử HOMO và HOMO-1 cho hai phân tử CO_2 và N_2 , chúng tôi đã tính được hai đại lượng này với các giá trị khác nhau của góc định phương từ 0° đến 90° .

Theo đó, khi tính toán tốc độ ion hóa từ hai lớp điện tử của hai phân tử N_2 và CO_2 , với trường hợp bước sóng laser 800 nm, tốc độ ion hóa từ lớp HOMO-1 rất nhỏ so với đại lượng này tính từ lớp HOMO. Khi tăng bước sóng lên 1200 nm, tốc độ ion hóa từ HOMO-1 so với tốc độ ion hóa của HOMO có thay đổi

đáng kể, đặc biệt là với các góc định phương lớn, 50° đến 90° đối với N_2 và 80° đến 90° đối với CO_2 .

Tiếp theo, khi tính HHG phát ra từ HOMO và HOMO-1 của cả hai phân tử ứng với hai trường hợp bước sóng 800nm và 1200 nm, chúng tôi nhận thấy rằng cường độ HHG từ lớp HOMO-1 có thể so sánh với cường độ HHG từ lớp HOMO khi các góc định phương tương đối lớn. Cụ thể, với các góc định phương lớn từ 40° đối với N_2 và từ 60° đối với CO_2 , HHG từ lớp HOMO-1 có cường độ gần bằng, thậm chí có lúc lớn hơn HHG từ lớp HOMO.

Chính điều này cho phép chúng tôi kết luận rằng đóng góp của HOMO-1 cần được tính đến trong khi nghiên cứu quá trình ion hóa và phát HHG của hai phân tử N_2 và CO_2 .

Ghi chú: Công trình này được thực hiện trong khuôn khổ đề tài nghiên cứu khoa học cấp cơ sở Trường Đại học Sư phạm TP HCM (mã số CS.2011.19.50)

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Bredtmann Timm, Chelkowski Szczepan, and Bandrauk Andr'e D. (2011), "Monitoring attosecond dynamics of coherent electron-nuclear wave packets by molecular high-order-harmonic generation", *Phys. Rev. A*, 84, pp. 021401 (4 tr.).
2. Corkum P.B. (1993), "Plasma perspective on strong field multiphoton ionization", *Phys. Rev. Lett.*, 71, pp. 1994 – 1997.
3. Frisch M. J. et al. (2003), GAUSSIAN 03, revision C.02, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA.
4. Haessler S., Caillat J., Boutu W., Giovanetti-Teixeira C., Ruchon T., Auguste T., Diveki Z., Breger P., Maquet A., Carre B., Taieb R., and Salieres P. (2010), "Attosecond imaging of molecular electronic wavepackets", *Nature Physics*, 6, pp. 200 – 206.
5. Itatani J., Levesque J., Zeidler D., Niikura H., Pepen H., Kieffer J. C., Corkum P. B., and Villeneuve D. M. (2004), "Tomographic imaging of molecular orbitals", *Nature*, 432, pp. 867 – 871.

6. Le V. H., Le A. T., Xie R.H., and Lin C. D. (2007), “Theoretical analysis of dynamic chemical imaging with lasers using high-order harmonic generation”, *Phys. Rev. A*, 76, 013414.
7. Le V. H., Nguyen N. T., Le A. T., Chen J., and Lin C. D. (2008), “Retrieval of interatomic separations of molecules from laser-induced high-order harmonic spectra”, *J. Phys. B*, 41, 085603.
8. Lein M. (2007), “Molecular imaging using recolliding electrons”, *J. Phys. B*, 40, tr. R135 – R173.
9. Lewenstein M., Balcou Ph., Ivanov M. Yu., L’Huillier Anne, and Corkum P. B. (1994), “Theory of high-harmonic generation by low-frequency laser fields”, *Phys. Rev. A*, 49, pp. 2117 – 2132.
10. Nguyen N. T. and Le V. H. (2011), “Retrieval of inter-atomic separations of complex molecules by ultra-short laser pulses”, *Comp. Theor. Chem.*, 964, pp.12 – 17.
11. Nguyen N. T., Tang B. V., and Le V. H. (2010), “Tracking molecular isomerization process with high harmonic generation by ultra-short laser pulses”, *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*, 949, pp. 52 – 56.
12. Sami Firoozeh, Vafae Mohsen and Shokri Babak (2011), “Nuclear classical dynamics of H₂ in an intense laser field”, *J. Phys. B*, 44, tr. 165601.
13. Torres R., Kajumba N., Underwood Jonathan G., Robinson J. S., Baker S., Tisch J.W. G., Nalda R. de, Bryan W. A., Velotta R., Altucci C., Turcu I. C. E., and Marangos J. P. (2007), “Probing Orbital Structure of Polyatomic Molecules by High-Order Harmonic Generation”, *Phys. Rev. Lett.*, 98.

(Ngày Tòa soạn nhận được bài: 29-02-2012; ngày chấp nhận đăng: 24-4-2012)