



TÍNH PHỔ SÓNG ĐIỀU HÒA BẬC CAO CỦA PHÂN TỬ CO TƯƠNG TÁC VỚI LASER HỒNG NGOẠI SÓNG TRUNG BẰNG PHƯƠNG PHÁP TDSE

Lê Thị Cẩm Tú^{1*}, Phan Thị Ngọc Loan², Trần Lan Phương², Hoàng Văn Hưng²

¹ Trường Đại học Tôn Đức Thắng

² Khoa Vật lý – Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh

Ngày nhận bài: 27-12-2017; ngày nhận bài sửa: 17-01-2018; ngày duyệt đăng: 19-6-2018

TÓM TẮT

Phát xạ sóng điều hòa bậc cao của phân tử phân cực CO tương tác với laser hồng ngoại sóng trung được tính bằng phương pháp giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE) trong gần đúng một electron hoạt động. Trong đó, ảnh hưởng của phân cực lõi động gây ra bởi các electron lõi cũng được tính đến. Chúng tôi đã chỉ ra rằng, phân cực lõi động ảnh hưởng đến cường độ và cực tiểu trong phổ HHG. Phương pháp này cho kết quả phù hợp với phương pháp Hartree-Fock phụ thuộc thời gian nhưng tiết kiệm thời gian và khối lượng tính toán hơn.

Từ khóa: sóng điều hòa bậc cao, phân tử CO, phân cực lõi động.

ABSTRACT

The calculation of the high-order harmonic generation from CO molecule exposed to mid-infrared lasers by the TDSE method

High-order harmonic spectra from polar molecule CO interacting with a mid-infrared laser pulse are calculated by numerically solving the time-dependent Schrödinger equation within the single active electron approximation. The influence of the dynamic core polarization caused by the core-electron in the laser field is also considered. We indicate that the dynamic core polarization affects the intensity and the minimum of the HHG spectra. This method provides the results in good agreement with the time-dependent Hartree-Fock method but it takes less time and resource consuming.

Keywords: high-order harmonics, CO molecule, dynamic core-electron polarization.

1. Mở đầu

Sóng điều hòa bậc cao (HHG) là một trong những hiệu ứng quang phi tuyến phát ra khi nguyên tử, phân tử tương tác với laser mạnh, xung cực ngắn. Cơ chế phát xạ HHG có thể hình dung bởi mô hình bán cổ điển được đưa ra bởi nhóm Corkum [1]. Đầu tiên, laser mạnh làm ion hóa nguyên tử, phân tử, kết quả là electron bị ion hóa ra miền liên tục. Sau đó, ở bước thứ hai, electron được gia tốc bởi trường điện laser. Cuối cùng, khi điện trường laser đổi chiều, electron bị lái ngược trở về và tái kết hợp với ion mẹ, chuyển mức năng lượng và phát ra photon năng lượng cao gọi là HHG.

* Email: lethicamtu@tdt.edu.vn

Trong ba thập kỉ trở lại đây, HHG thu hút rất nhiều nghiên cứu cả về mặt cả lí thuyết lẫn thực nghiệm bởi những ứng dụng quan trọng trong vật lí, hóa học và sinh học. Từ phổ HHG có thể thu nhận được thông tin cấu trúc, như hình ảnh lớp vân đạo ngoài cùng bị electron chiếm đóng (HOMO) [2, 3], hay khoảng cách liên hạt nhân [4] của phân tử. Thông tin cấu trúc động như chuyển động của electron [5] hay dao động hạt nhân [6] của phân tử cũng được trích xuất từ phổ HHG với độ phân giải không gian cỡ Angstrom và thời gian cỡ femto giây ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$). Ngoài ra, HHG còn là nguồn duy nhất cho phép tạo xung cực ngắn, năng lượng cao có độ dài cỡ atto giây ($1 \text{ as} = 10^{-18} \text{ s}$) [7]. Xung atto giây có ý nghĩa rất quan trọng, bởi đây chính là cấp độ chuyển động của electron xung quanh hạt nhân nguyên tử, điều này giúp đi sâu nghiên cứu các quá trình lượng tử [5]. Cuộc chạy đua rút ngắn xung atto giây diễn ra rất sôi nổi trong vài năm trở lại đây. Năm 2008, dùng laser có bước sóng 720 nm (vùng khả kiến), nhóm Goulielmakis đã tạo ra xung atto giây có độ dài xung 80 as [8].

Muốn tạo ra xung có độ dài ngắn hơn nữa, cần phải tạo ra các photon HHG có năng lượng cao. Do đó, laser có bước sóng hồng ngoại sóng trung đã được ứng dụng để nâng cao năng lượng photon thu được trong phổ HHG, từ đó rút ngắn độ dài xung atto giây [7]. Năm 2014, Chu và cộng sự trong [7] đã dự đoán bằng lí thuyết rằng nếu sử dụng hai bước sóng hồng ngoại 2200 nm và 1050 nm chiếu vào nguyên tử He có thể rút ngắn độ dài xung xuống 18 as. Ngoài ra, trong [3], các tác giả cũng đã chỉ ra rằng độ rộng của miền phẳng trong phổ HHG ảnh hưởng mang tính quyết định đến chất lượng HOMO của phân tử được tái tạo bằng phương pháp chụp ảnh cắt lớp. Với cường độ laser $2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, nếu như dùng laser có bước sóng 800 nm sẽ cho miền phẳng bị giới hạn dưới 73 eV thì dùng laser hồng ngoại sóng trung 1200 nm sẽ mở rộng miền phẳng tới 117 eV. Các tác giả [3] cho rằng dùng laser có bước sóng dài trong phổ hồng ngoại, từ 1200 nm hoặc dài hơn sẽ cho phép tái tạo HOMO của phân tử chính xác hơn so với khi sử dụng laser có bước sóng ngắn 800 nm thông thường. Như vậy, phổ HHG thu được khi tương tác với laser có bước sóng dài có ý nghĩa rất quan trọng trong vật lí atto giây.

Hiện nay, có hai hướng tiếp cận chính để tính phổ HHG. Đầu tiên là cách dùng các mô hình gần đúng như mô hình ba bước bán cổ điển Lewenstein với xấp xỉ trường mạnh [1], lí thuyết quỹ đạo lượng tử [9], hay gần đây là lí thuyết tái tán xạ định lượng (QRS) [10]. Cách tiếp cận này đơn giản, có thể áp dụng cho những phân tử phức tạp, đồng thời cung cấp bức tranh vật lí về cơ chế phát xạ HHG, tuy nhiên độ chính xác cần phải được cải thiện hơn [10]. Một hướng tiếp cận khác là dùng các phương pháp số *ab initio*, như phương pháp giải số phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian (TDSE), phương pháp phiếm hàm mật độ phụ thuộc thời gian (TDDFT) hay phương pháp Hartree-Fock phụ thuộc thời gian (TDHF) [11, 12]. Các phương pháp này cho kết quả “chính xác”, có thể so sánh được với thực nghiệm. Phương pháp TDHF và TDDFT tính đến toàn bộ đóng góp của các lớp electron, nên khối lượng tính toán rất lớn, chiếm nhiều tài nguyên máy tính và

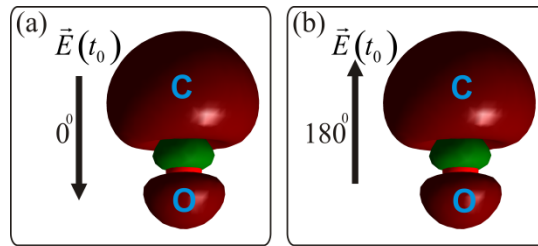
thời gian. Phương pháp TDSE là phương pháp giải số trực tiếp từ phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian. Phương pháp TDSE mới được áp dụng để tính HHG cho nguyên tử và các phân tử đơn giản có ít hơn hai electron [4, 6]. Để mở rộng cho các phân tử lớn hơn, phương pháp TDSE được kết hợp với mô hình gần đúng một electron hoạt động (SAE) [13] và đã cho kết quả phù hợp với thực nghiệm và phương pháp *ab initio* khác [12]. Theo mô hình SAE, toàn bộ nguyên tử được xem như chỉ có một electron chuyển động trong trường thế gây ra bởi hạt nhân và các electron khác [13]. Phương pháp TDSE kết hợp SAE đã được áp dụng thành công cho nguyên tử nhiều electron. Trong các nghiên cứu trước đây chúng tôi đã áp dụng phương pháp này để tính xác suất ion hóa cho phân tử N_2 , O_2 , CO_2 , và phân tử phân cực CO [14]. Chúng tôi cũng đã phát triển phương pháp TDSE kết hợp SAE để tính phổ phát xạ HHG cho phân tử đối xứng CO_2 , từ đó trích xuất thông tin cấu trúc phân tử [15]. Hiện nay, phương pháp TDSE kết hợp SAE được coi là phương pháp tính nhanh, chính xác, được dùng làm thước đo các phương pháp tính mô hình như phương pháp Lewenstein, phương pháp QRS [10]. Tuy nhiên, trong các công trình nghiên cứu gần đây đã chỉ ra đóng góp của các lớp electron bên trong, cụ thể là của động lực học phân cực lõi lên quá trình ion hóa của phân tử CO là quan trọng [11, 14]. Việc tính thêm động lực học của các electron lớp bên trong trong trường laser cho phép thu được các kết quả lý thuyết xác suất ion hóa phù hợp với thực nghiệm [11, 14]. Ion hóa xuyên hầm là bước đầu tiên của quá trình phát xạ sóng HHG [1]. Hơn nữa, trường phân cực lõi cũng ảnh hưởng đến giai đoạn tái va chạm của electron với ion mẹ [12]. Trong [12], các tác giả đã sử dụng mô hình một orbital hoạt động (SAO) để mô phỏng HHG phát ra từ phân tử CO trong trường laser mạnh. Trong mô hình SAO, chỉ có lớp orbital ngoài cùng hoạt động, còn các orbital còn lại cố định cùng với hạt nhân. Để tính đến ảnh hưởng của các electron lớp trong cùng, các tác giả đã tính thêm động lực học phân cực lõi kết hợp SAO. Kết quả này gần như tương tự khi so với phương pháp TDHF. Từ đó các tác giả đã khẳng định rằng, phân cực lõi động đóng vai trò quan trọng và quan sát được rõ ràng trên phổ HHG [12]. Tuy nhiên, phương pháp TDHF có khối lượng tính toán lớn, thời gian tính toán lâu.

Trong công trình này, chúng tôi sẽ xây dựng phương pháp TDSE kết hợp mô hình SAE tính đến hiệu ứng phân cực lõi động để tính phổ HHG của phân tử phân cực CO khi tương tác với laser bước sóng hồng ngoại sóng trung 1200 nm và 1600 nm. Phương pháp TDSE trong xấp xỉ SAE đã được chúng tôi áp dụng để tính phổ phát xạ HHG cho phân tử đối xứng CO_2 [15], tuy nhiên chưa được áp dụng cho phân tử phân cực CO. Hơn nữa, như đã thảo luận ở trên, phổ HHG ở vùng bước sóng dài có ý nghĩa rất quan trọng, tuy nhiên chưa được tính lý thuyết cho phân tử CO. Khi sử dụng bước sóng dài có thể bỏ qua đóng góp của các orbital dưới HOMO [16], điều này là cho việc sử dụng SAE càng trở nên hợp lý. Khi tương tác với laser bước sóng dài, electron bị kéo ra rất xa so với nhân nên mô phỏng phổ HHG ở vùng này gặp nhiều khó khăn hơn so với sử dụng bước sóng 800 nm

thông thường. Chúng tôi chỉ ra rằng, dùng phương pháp TDSE kết hợp SAE tính đến phân cực lõi động cho phép thu được phổ HHG của phân tử phân cực CO phù hợp với kết quả mô phỏng bằng phương pháp TDHF, tuy nhiên thời gian và khối lượng tính toán ít hơn.

2. Phương pháp TDSE tính phổ HHG của phân tử phân cực CO

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày phương pháp TDSE kết hợp SAE có tính đến hiệu ứng phân cực lõi động được sử dụng để tính phổ HHG cho phân tử phân cực CO.



Hình 1. Mô hình tính toán HHG khi phân tử CO tương tác với laser với góc định hướng 0° (a) và 180° (b)

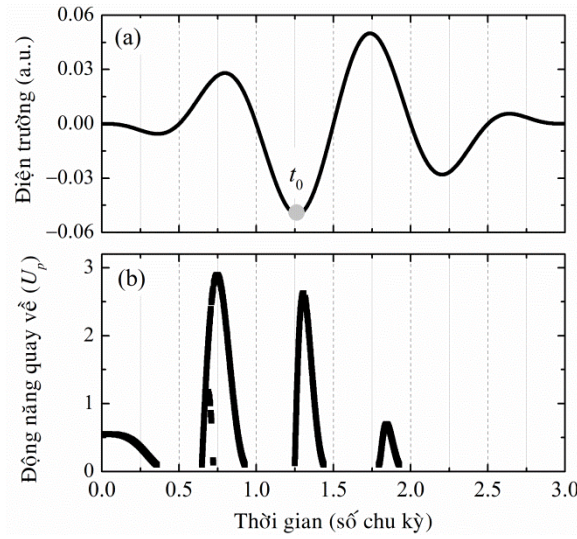
Mô hình bài toán được biểu diễn như trên Hình 1. Phân tử CO với khoảng cách liên hạt nhân là 2.132 a.u được định hướng “hoàn toàn” bằng một laser yếu. Sau đó, một laser mạnh được chiếu vào phân tử với góc định hướng θ . Trong bài báo này, chúng tôi quan tâm tới hai góc định hướng 0° và 180° như trong công trình [12]. Cụ thể, góc định hướng 0° được định nghĩa là góc khi vector điện trường của laser đạt cực đại tại thời điểm t_0 (Hình 2) hướng theo chiều từ C tới O (Hình 1a). Ngược lại, khi vector điện trường tại t_0 hướng theo chiều từ O tới C, ta có góc định hướng 180° (Hình 1b). Chúng tôi sẽ giải thích cụ thể trong phần kết quả tại sao lại định nghĩa dựa vào thời điểm t_0 .

Phương trình Schrödinger phụ thuộc thời gian được viết trong hệ đơn vị nguyên tử có dạng

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + \hat{V}_{SAE}(\vec{r}) + \hat{V}_p(\vec{r}, t) + \hat{V}_L(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) = i \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}, \quad (1)$$

trong đó, $\hat{V}_{SAE}(\vec{r})$ là thế gần đúng một electron gây bởi tương tác của hạt nhân và các electron còn lại lên electron hoạt động. Thế năng $\hat{V}_{SAE}(\vec{r})$ được tính theo mô hình LB với các thông số $\alpha = 1.15$ và $\beta = 0.05$ [15, 17]. Thế năng tương tác của laser với phân tử phân cực CO gồm hai thành phần. Thành phần đầu tiên là thế năng tương tác của laser với lưỡng cực electron có dạng $\hat{V}_L(\vec{r}, t) = \vec{r} \cdot \vec{E}(t)$, với $\vec{E}(t)$ là điện trường của laser. Thành phần thứ hai là thế năng tương tác gây bởi động lực học phân cực lõi (của các electron còn lại và hạt

nhân) với lưỡng cực electron $\hat{V}_p(\vec{r}, t) = -\frac{[\hat{\alpha}\vec{E}(t)] \cdot \vec{r}}{r^3}$. Trong đó, độ phân cực của phân tử được đặc trưng bởi tensor phân cực bậc hai $\hat{\alpha}$. Do phân tử CO thẳng được định phương cố định dọc theo trục z nên chỉ có ba thành phần đường chéo của tensor khác không, và cụ thể bằng $\alpha_{xx} = \alpha_{yy} = 6.72$ a.u. và $\alpha_{zz} = 12.22$ a.u. Phương pháp TDSE kết hợp mô hình SAE tính đến phân cực lõi động của phân tử CO đã được chúng tôi sử dụng để tính mật độ ion hóa của phân tử CO khi tương tác với laser mạnh [14, 17]. Phương pháp giải phương trình (1) từ đó thu được phát xạ HHG từ tương tác của phân tử CO với chùm laser đã được chúng tôi mô tả chi tiết trong [15].



Hình 2. (a) Điện trường của laser tương tác với phân tử CO
(b) Mô phỏng cổ điển động năng quay trở về của electron theo thời gian ion hóa
Laser được sử dụng có cường độ 1×10^{14} W/cm², độ dài xung ba chu kỳ

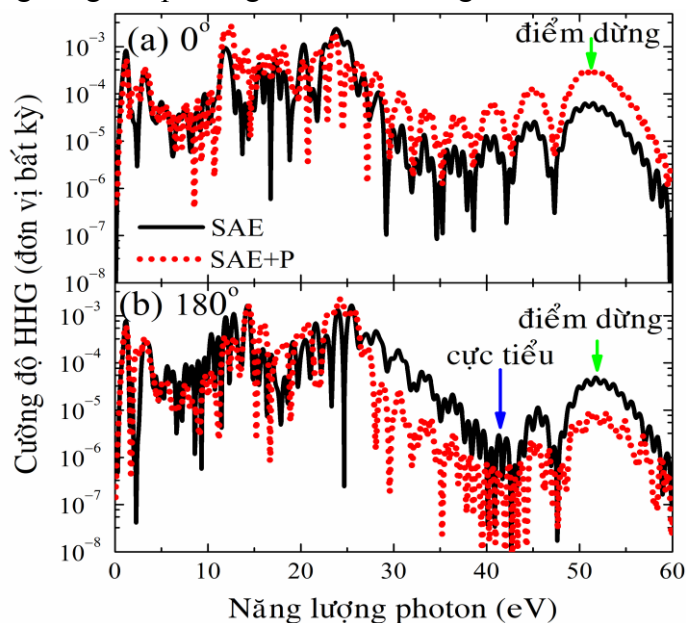
Trong nghiên cứu này, laser tương tác được sử dụng có dạng

$$E(t) = E_{\max} \sin^2\left(\frac{\pi t}{\tau}\right) \sin(\omega_0 t + \phi_{\text{CEP}}), \quad (2)$$

với pha ban đầu $\phi_{\text{CEP}} = \pi$. Chúng tôi sử dụng laser có độ dài xung ba chu kỳ, cường độ 1×10^{14} W/cm². Các thông số laser này được sử dụng nhằm để so sánh với các kết quả HHG mô phỏng bằng phương pháp TDHF như trong công trình [12]. Dạng của laser được biểu diễn trên Hình 2a.

3. Ảnh hưởng của phân cực lõi động electron lên sự phát xạ sóng điều hòa bậc cao của phân tử CO

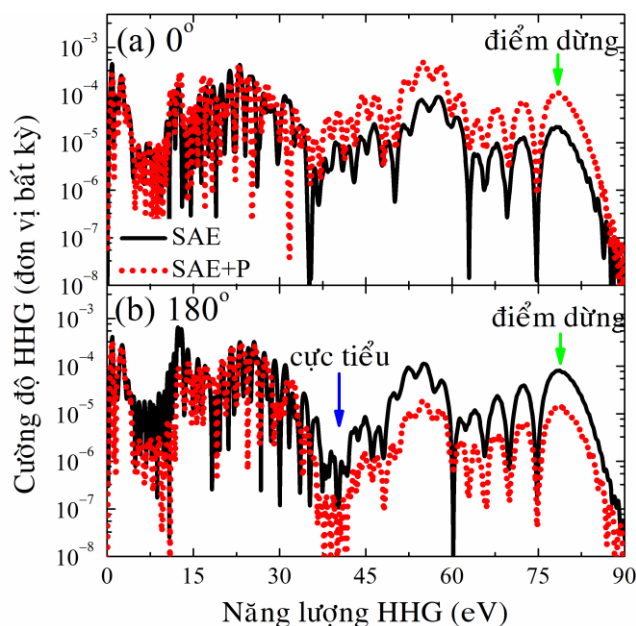
Phổ HHG tính bằng phương pháp TDSE kết hợp SAE của phân tử CO tương tác với laser có bước sóng 1200 nm (tức $\omega_0 = 0.038$ a.u.) được thể hiện trên Hình 3, và bước sóng 1600 nm ($\omega_0 = 0.029$ a.u.) được thể hiện trên Hình 4. Tại hai góc 0° và 180° , HHG chỉ có phân cực song song với phương của điện trường laser.



Hình 3. HHG của phân tử CO khi tương tác với laser có cường độ 1×10^{14} W/cm², bước sóng 1200 nm, ba chu kỳ với góc định hướng 0° (a) và 180° (b). Kết quả có tính đến hiệu ứng phân cực lõi động (đường nét đứt màu đỏ); và không tính đến hiệu ứng phân cực lõi động (đường nét liền màu đen)

Phổ HHG trong cả Hình 3 và 4 đều có dạng đặc trưng với miền phẳng có cường độ HHG hầu như không đổi. Miền phẳng này trải dài trên một vùng của tần số, sau đó, kết thúc tại điểm dừng. Sử dụng laser có cường độ 1×10^{14} W/cm², với bước sóng 1200 nm, điểm dừng của phổ HHG tương ứng với năng lượng HHG 51 eV (Hình 3). Với laser bước sóng dài hơn 1600 nm, miền phẳng đã được mở rộng tới năng lượng 78 eV (Hình 4). Chú ý rằng, điểm dừng này không tuân theo công thức $3.17U_p + 1.32I_p$, với U_p và I_p lần lượt là thế trọng động của electron trong trường laser và thế ion hóa của phân tử [1]. Với laser cực ngắn chúng tôi sử dụng trong nghiên cứu này, mô phỏng cổ điển cho năng lượng HHG cực đại tuân theo công thức $2.89U_p + I_p$ (Hình 2b). Năng lượng photon cực đại tính toán từ công thức này là 53 eV

với laser 1200 nm, và 83 eV với laser 1600 nm, phù hợp với kết quả mô phỏng bằng TDSE (Hình 3 và Hình 4). Ngoài ra, có thể thấy hầu như phổ HHG được tạo thành từ những electron bị ion hóa xung quanh thời điểm t_0 , đây chính là lí do chúng tôi sử dụng hướng của laser tại thời điểm t_0 và trực phân tử để định nghĩa góc định hướng.



Hình 4. Tương tự như Hình 3 nhưng với bước sóng 1600 nm

Chúng tôi tính phổ HHG cho cả hai trường hợp (i) bỏ qua và (ii) xét đến hiệu ứng phân cực lõi động của phân tử CO. Ở trường hợp đầu tiên (i), chúng tôi chỉ tính đến hoạt động của một electron ngoài cùng, các electron còn lại và hạt nhân được coi là “đóng băng”, tức sử dụng mô hình SAE và bỏ qua động lực học của các electron còn lại. Kết quả này được chúng tôi biểu diễn bằng đường nét liền màu đen trên Hình 3 và Hình 4. Trong trường hợp còn lại (ii), ngoài thế SAE, phân cực lõi động được tính đến thông qua thế phân cực $\hat{V}_p(\vec{r}, t)$ và phổ HHG được biểu diễn bằng đường nét đứt màu đỏ. Ta thấy, cường độ phổ HHG có tính đến hiệu ứng phân cực lõi có cường độ lớn hơn so với khi không xét đến hiệu ứng này với góc định hướng $\theta = 0^\circ$. Ngược lại, với góc định hướng $\theta = 180^\circ$, phổ HHG khi xét đến động lực học lõi yếu hơn so với khi bị bỏ qua. Kết quả này hoàn toàn giống nhận định trong công trình [12] khi laser có bước sóng 800 nm. Trong [12], các tác giả giải thích hiện tượng này là do sự thay đổi xác suất ion hóa khi tính đến hoặc bỏ qua động lực học phân cực lõi. Như vậy, hiệu ứng tăng cường hoặc suy giảm cường độ HHG khi xét đến động lực học phân cực lõi là phổ quát cho cả vùng bước sóng dài.

Đặc biệt hơn, bên cạnh cường độ phổ HHG, động lực học của lớp electron bên trong còn ảnh hưởng tới điểm cực tiểu trên phổ HHG. Từ Hình 3b và Hình 4b, ứng với góc định hướng $\theta = 180^\circ$, có thể nhìn thấy rất rõ điểm giao thoa cực tiểu ứng với năng lượng HHG cỡ 40 eV cho cả hai bước sóng 1200nm và 1600 nm. Sự không phụ thuộc vào thông số laser cho thấy giao thoa cực tiểu phản ánh cấu trúc của phân tử CO. Kết luận này giống công bố của các nghiên cứu về giao thoa cực tiểu trong các công trình nghiên cứu trước đây [4]. Trong [4], các tác giả giải thích giao thoa gây ra bởi bó sóng electron bằng mô hình hai tâm, và vị trí giao thoa chỉ phụ thuộc vào cấu trúc phân tử và sự định phương của nó trong trường laser. Tuy nhiên, khi xét đến phân cực lõi động của lớp electron bên trong, cực tiểu được nhìn thấy rõ nét hơn so với khi bỏ qua hiệu ứng này. Kết quả của chúng tôi bằng phương pháp TDSE cho bước sóng dài tương tự như kết quả của Zhang và các cộng sự [12] cho bước sóng 800 nm bằng phương pháp TDHF. Trong [12], các tác giả cho rằng, tại góc $\theta = 180^\circ$, khi tính đến động lực học phân cực lõi, các electron quay trở về sẽ nhìn orbital lớp ngoài cùng bị biến dạng (kéo dẫn ra hoặc co vào) nhiều hơn, so với khi chỉ tính một orbital hoạt động SAO. Điều này dẫn đến cực tiểu của moment lưỡng cực quang tái kết hợp tại thời điểm tái kết hợp sâu hơn khi tính đến động lực học của lớp electron bên trong. Như vậy, bằng phương pháp TDSE sử dụng mô hình SAE tính đến phân cực lõi động cho kết quả tương tự như phương pháp TDHF.

4. Kết luận

Như vậy trong bài báo này, chúng tôi đã xây dựng được phương pháp TDSE trong gần đúng một electron hoạt động, có xét đến ảnh hưởng của phân cực lõi động và mô phỏng thành công phổ HHG cho tương tác của CO với laser hồng ngoại. Chúng tôi đã chỉ ra rằng, hiệu ứng phân cực lõi động làm tăng ($\theta = 0^\circ$) hoặc giảm ($\theta = 180^\circ$) cường độ phổ HHG. Hơn nữa, phân cực lõi làm thay đổi độ biến dạng orbital của phân tử CO, dẫn đến làm rõ hơn điểm cực tiểu giao thoa trên phổ HHG so với khi bỏ qua hiệu ứng này. Điều này hoàn toàn trùng hợp với công kết quả thu được trong công trình của Zhang và các cộng sự [12] thu được bằng phương pháp TDHF cho phân tử phân cực CO. Qua đó, chúng tôi chứng minh về mặt phương pháp là có thể sử dụng TDSE trong gần đúng một electron, có xét đến ảnh hưởng của phân cực lõi động để tính HHG khi tương tác với laser hồng ngoại. Phương pháp này rút ngắn thời gian và khối lượng tính toán so với phương pháp TDHF.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

❖ **Lời cảm ơn:** Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo cho đề tài mã số B2016.19.10 và bởi Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh cho đề tài cấp cơ sở 2016 mã số CS2016.19.08.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] M. Lewenstein, Ph. Balcou, M. Yu. Ivanov, A. L'Huillier, and P. B. Corkum, "Theory of high-harmonic generation by low frequency laser fields," *Phys. Rev. A* **49**, pp. 2117-2132, 1994.
- [2] J. Itatani, J. Levesque, D. Zeidler, H. Niikura, H. Pépin, J. C. Kieffer, P. B. Corkum, and D. M. Villeneuve, "Tomographic imaging of molecular orbitals," *Nature* **432**, pp.867-871, 2004.
- [3] V. H. Le, A. T. Le, R. H. Xie, and C. D. Lin, "Theoretical analysis of dynamic chemical imaging with lasers using high-order harmonic generation," *Phys. Rev. A* **76**, pp.013414-13, 2007.
- [4] M. Lein, N. Hay, R. Velotta, J. P. Marangos, and P. L. Knight, "Interference effects in high-order harmonic generation with molecules," *Phys. Rev. A* **66**, pp.0238056-6, 2002.
- [5] H. Niikura, F. Légaré, R. Hasbani, A. D. Bandrauk, M. Yu. Ivanov, D.M. Villeneuve, and P. B. Corkum, "Sub-laser-cycle electron pulses for probing molecular dynamics", *Nature* **417**, pp.917-922, 2002.
- [6] M. Lein, "Attosecond probing of vibrational dynamics with high-harmonic generation," *Phys. Rev. Lett.* **94**, pp.053004-4, 2005.
- [7] P. C. Li, C. Laughlin, and S. I. Chu, "Generation of isolated sub-20-attosecond pulses from He atoms by two-color midinfrared laser fields," *Phys. Rev. A* **89**, pp.023431-5, 2014.
- [8] E. Goulielmakis, M. Schultze, M. Hofstetter, V. S. Yakovlev, J. Gagnon, M. Uiberacker, A. L. Aquila, E. M. Gullikson, D. T. Attwood, R. Kienberger, F. Krausz, U. Kleineberg, "Single-cycle nonlinear optics," *Science* **320**, pp.1614-1617, 2008.
- [9] P. Salieres, B. Carre, L. Le Deroff, F. Grasbon, G.G. Paulus, H. Walther, R. Kopold, W. Becker, D.B. Milosevic, A. Sanpera and M. Lewenstein, "Feynman's path-integral approach for intense-laser-atom interactions", *Science*, **292**(5518), pp.902-905, 2001.
- [10] A. T. Le, R. R. Lucchese, S. Tonzani, T. Morishita, and C. D. Lin, "Quantitative rescattering theory for high-order harmonic generation from molecules," *Phys. Rev. A* **80**, pp.013401-23, 2009.
- [11] B. Zhang, J. Yuan and Z. Zhao, "Dynamic core polarization in strong-field ionization of CO molecules," *Phys. Rev. Lett.* **111**, pp.163001-5, 2013.
- [12] B. Zhang, J. Yuan, and Z. Zhao, "Dynamic orbitals in high-order harmonic generation from CO molecules," *Phys. Rev. A* **90**, pp.035402-5,2014.
- [13] S. F. Zhao, C. Jin, A. T. Le, and C. D. Lin, "Effect of an improved molecular potential on strong-field tunneling ionization of molecules," *Phys. Rev. A* **82**, pp.035402-4, 2010.
- [14] V. H. Hoang, S. F. Zhao, V. H. Le, and A. T. Le, "Influence of permanent dipole and dynamic core-electron polarization on tunneling ionization of polar molecules," *Phys. Rev. A* **95**, pp.023407-8, 2017.
- [15] C. T. Le, L. P. Tran, V. H. Hoang, "High-order harmonic generation of CO₂ from ab initio method and an application for molecular structure retrieval", *HCMUP Journal of Science* **15**, pp.31-42, 2017.
- [16] C. Vozzi, M. Negro, F. Calegari, G. Sansone, M. Nisoli, S. De Silvestri, and S. Stagira, "Generalized molecular orbital tomography", *Nature Physics*, **7**(10), pp.822-826, 2011.
- [17] V.H Hoang, "The effect of dynamic core polarization on ionization probability of CO molecule by ab initio method," *HCMUP Journal of Science* **12**, pp.14-21, 2016.